

Beiträge zur Theorie der Terahertz-Erzeugung in Halbleitern

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
in Frankfurt am Main

von
Gerald Meinert
aus Kelkheim/Taunus

Frankfurt, Mai 2001
(DF1)

Dekan: Prof. Dr. Werner Mäntele

Gutachter: Prof. Dr. Ladislaus Bányai
Prof. Dr. Harmut Haug

Datum der Disputation: 28.06.2001

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Überblick	3
1.1	Notation und Terminologie	7
2	Grundlagen	9
2.1	Bandstruktur	10
2.2	Elektronen und Phononen	14
2.3	Die Kopplung elektro-magnetischer Felder	18
2.4	Das Drei-Niveau-System	20
2.5	Terahertz-Spektroskopie	22
3	Stromkinetik in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern	25
3.1	Klassische Bewegung in gekreuzten Feldern	28
3.2	Die Darstellung des verschobenen Oszillators	32
3.3	Die Kopplung an das Lichtfeld	34
3.4	Streuung durch longitudinale, optische Phononen	37
3.5	Die lokale Zustandsdichte	42
3.6	Ableitung der Kinetik auf einer reduzierten Untermenge der Dichtematrix	45
3.7	Terahertz-Stromoszillationen	49
4	Klassische Polaronen im elektrischen Feld	55
4.1	Ein klassisches Polaronmodell	58
4.2	Ein lösbares Modell	61
4.3	Das effektive Potenzial	63
4.4	Diffusives und ballistisches Regime	68
4.5	Willkürliche Richtungen des elektrischen Feldes	73
4.6	Gallium-Arsenid-Parameter	77
4.7	Die phononische Dielektrizitätsfunktion	79

5	Valenzbandstruktur eines GaAs-Übergitters	81
5.1	Bloch-Elektronen im elektrischen Feld	84
5.2	Die Bloch-Gleichungen mit elektrischem Feld	90
5.3	Das einfache Kronig-Penney-Modell	95
5.4	Das Kronig-Penney-Modell für die Löcher	99
5.5	Numerische Ergebnisse	102
6	Zusammenfassung	106
A	Stoßterme für die Intraband-Größen in der Voigt-Geometrie	109
B	Der dynamische Franz-Keldysh-Effekt in der Voigt-Geometrie	112
C	Bloch- und Wannier-Funktionen	115
	Abbildungsverzeichnis	122
	Literaturverzeichnis	126
	Lebenslauf	141
	Publikationen und Vorträge	142
	Danksagung	143

Kapitel 1

Einleitung und Überblick

Terahertz (THz) bezeichnet die Frequenz von 10^{12} Hertz in der Lücke dessen, was sich bequem durch Elektronik erzeugen lässt und allgemein unter dem Namen Mikrowellen verwandt wird, und dem optischen Spektralbereich, wo die Anwendungen unter dem Stichwort Photonik laufen. Terahertz-Strahlung umfasst damit die Strahlung der ferninfraroten Spektralregion. Sie überdeckt einen Bereich zwischen 100 GHz und 10 THz, in dem Materialien wie Papier oder viele Kunststoffe transparent sind, Wasser hingegen starke Absorptionslinien aufweist. Daraus ergeben sich zahlreiche Anwendungsmöglichkeiten der THz-Technologie [Nus96, Nus98, Sie, Zha98] (siehe Abb. 1.1).

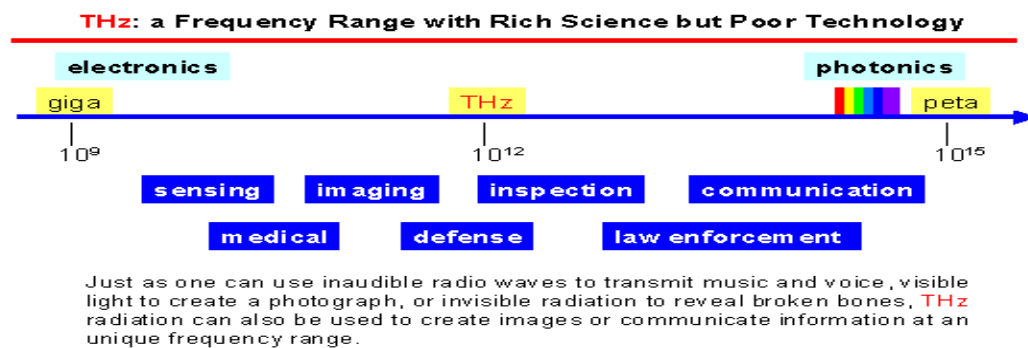


Abbildung 1.1: Anwendungsmöglichkeiten der THz-Technologie [Zha98]

Die Tomographie von Gewebe in Biologie und Medizin [Hu95/2] mit THz-Strahlung hat im Gegensatz zu der derzeit gängigen Konkurrenztechnologie der Röntgen-Strahlung den Vorteil, dass aufgrund der niedrigen Photonenergien Schädigungen durch Ionisationsprozesse ausgeschlossen sind. Ebenso kann man sich Sicherheitskontrollen — etwa von Gepäck auf Flughäfen — vorstellen. Weitere Anwendungsvorschläge nennen Qualitätsmanagement, Prozessanalyse oder die Überwachung chemischer Reaktionen oder von Emissionen im Umweltschutz. Schließlich fanden THz-Untersuchungen Verwendung an Miniaturmodellen, um von den Ergebnissen in den Frequenzbereich der Radarstrahlung bei Echtgröße zu extrapolieren [Che].

Stecken diese Anwendungen noch in den Kinderschuhen bzw. spielt da noch viel Zukunftsmusik mit, so sind die Ergebnisse in der Grundlagenforschung — und hier sei in der näheren Umgebung dieser Arbeit nur auf die Halbleiteroptik eingegangen — meterweise in den Bibliotheken zu „begreifen“. Effekte wie „dynamische Lokalisation“ [Dun, Hol, Mei98, Mei95, Kea, Win, Gho] oder der „dynamische Franz-Keldysh-Effekt“ [Yac, Reb, Jau, Nor, Hug] sind ohne THz-Einstrahlung undenkbar. Bei diesen Anwendungen kam der Freie-Elektronen-Laser zum Einsatz. War es der ursprünglichen THz-Spektroskopie (sei es in der Optischer-Pump-THz-Test-Konfiguration (optical-pump-THz-probe-spectroscopy) oder in der zeitaufgelösten Variante (time-domain-THz-spectroscopy) siehe [Gor00/1]) vom prinzipiellen Standpunkt einerlei, um was für Quellen es sich handelt, so musste der immense materielle Aufwand beim Freien-Elektronen-Laser Ansporn sein, nach anderen THz-Quellen Ausschau zu halten. Ähnlich wie in der Lasertechnologie erscheint die Miniaturisierung im Festkörper am Vielversprechensten. Dabei vertiefte die Suche nach neuen, effizienten Strahlungsquellen das Wissen über die ultraschnellen Prozesse im Halbleiter, und das Wissen über die ultraschnellen Prozesse im Halbleiter führte zu immer neuen Vorschlägen und Entdeckungen von Strahlungsquellen.

Zwei Kennzahlen heben hier die besondere Bedeutung der THz-Strahlung hervor: Eine Frequenz von 1 THz entspricht einer Periodendauer von 1 ps. Die typischen Dephasierungszeiten von Quasiteilchen (Bloch-Elektronen, Exzitonen, Plasmonen und Phononen) in Halbleitern und Halbleiter-Heterostrukturen liegen im hohen Femtosekunden- bis mittleren Pikosekundenbereich. Man wird die Beobachtung von THz-Emission durch Mechanismen dieser Quasiteilchen nicht von vorneherein ausschließen können, im Gegenteil darf man im Umkehrschluss sogar hoffen, gerade aufgrund der Strahlungsmerkmale noch mehr über deren Dämpfung und Dephasierung zu erfahren. Ebenso interessant ist die THz-Strahlung von der energetischen Perspektive: Das Äquivalent von 1 THz sind 4.1 meV. Das ist aber ein Quantum, das geradezu prädestiniert ist zur Untersuchung um die Bandkante herum: Die Exziton-Bindungsenergie

beträgt etwa 4 meV, die LO-Phononenergie 36 meV (beides GaAs-Werte), im gleichen Bereich findet man für übliche Dichten das Plasmon und für gängige Heterostrukturen die Energieaufspaltung bzw. Minibandbreiten. Die Anregung freier Elektron-Loch-Paare mit einem kurzen optischen Femtosekunden-Puls und einem verzögerten THz-Testpuls, der nur aus einem Zyklus besteht, erlaubt in idealer Weise den von Vu *et al.* [Vu] berechnete zeitabhängigen Aufbau der Abschirmung eines Coulomb-Potenzials zu messen. In vorläufigen Messungen [Hub01] wurde das Spektrum der inversen dielektrischen Funktion für verschiedene Verzögerungszeiten sowohl mit einer Plasmonresonanz, sowie mit einer gekoppelten LO-Phonon-Plasmon-Doppelresonanz in Übereinstimmung mit entsprechenden Berechnungen [Ban98, Vu] beobachtet.

„Optische Rektifizierung“ (optical rectification) benutzt elektrooptische Kristalle als nicht-lineare Medien, die THz-Strahlung entsteht als χ^2 -Prozess (Differenz-Frequenz-Erzeugung) aus den optischen Pump-Pulsen [Bonv, Zha96, Ehr, Kai, Hub00]. In [Cho, Küt92/1, Küt92/2, Scho, Kuz95, Dek, Lei99, Lei00] wurde gezeigt, dass kohärente Phononen THz-Strahlung erzeugen können. Stammen die Signale von den Elektronen, so ist die Unterscheidung zwischen dem kollektiven Phänomen der Plasma-Oszillationen [Ker, Bra, Unt99, Unt00, Bak, Kem] und „elektronischer“ Abstrahlung angebracht. Natürlich handelt es sich auch bei den elektronischen Signalen um ein kollektives Phänomen, da erst die Summe vieler individueller Elektronen-Signale messbar ist. Im Gegensatz zu den Plasma-Oszillationen ist die Frequenz jedoch nicht durch die Dichte bestimmt, da es sich um Einteilchen-Mechanismen handelt.

Das zwischem dem Quantentopf und dem Übergitter anzusiedelnde System des Quantenkaskadenlaser [Fai94, Fai96, Cap, Gor00/2] ist bereits in das Anwendungsstadium fortgeschritten. Am asymmetrischen Doppel-Quantentopf [Nus94, kLeo91, Ros92, Hugg] werden wir in den Grundlagen (Abschn. 2.4) exemplarisch die Ideen anreissen, die in diesen Systemen zur THz-Erzeugung führen; darüber hinaus sind aber ebenso die Schwebungen zwischen Schwer- und Leicht-Loch-Zuständen im Quantentopf [Nus94, Pla] zu erwähnen. Übergitter bzw. Bloch-Oszillationen werden im Kapitel 5 ausführlich besprochen, so dass an dieser Stelle von Literaturhinweisen abgesehen wird. In Volumenhalbleitern führen vor allem „instantane Polarisierung“ und Ladungstransport in elektrischen Feldern [Hu91, Hu94, Hu95/1, Kuz95, Lei99, Lei00] zu THz-Signalen. Für ein zusätzlich angelegtes Magnetfeld sind Experimente in [Som94, Som96, Sar, Oht98, Izu, Oht00] zu finden.

In diesem Umfeld sind die Beiträge der Arbeit angesiedelt, so dass hiermit die Verwirrung aufgeklärt ist, die vielleicht ein erster Blick in das Inhaltsverzeichnis ausgelöst hat: Die Spange, die die Arbeit zusammenhält, ist — bei allen Unterschieden in Modellen und Methoden — die Fragestellung, unter welcher die verschiedenen Systeme

hier analysiert werden: Inwiefern dienen sie, unser Wissen um die Erzeugung von THz-Strahlung in Halbleitern zu vermehren.

Kapitel 3 liefert eine Theorie der THz-Emission in der Voigt-Geometrie gekreuzter elektrischer und magnetischer Felder. Auf der Basis der quantenmechanischen Bloch-Gleichungen wird die Dynamik der Ein-Teilchen-Dichtematrixelemente berechnet. Die Berechnung quantenzahlabhängiger Lebenszeiten erklärt die Beobachtungen von THz-Oszillationen auf einer Pikosekunden-Zeitskala.

In Kapitel 4 wird im Rahmen eines klassischen Modells erstmals ein Polaron-Mechanismus, d.h. ein Mechanismus auf der Basis der Wechselwirkung der Elektronen mit Phononen, als THz-Emitter behandelt.

Kapitel 5 stellt einen Beitrag zum Thema Bloch-Oszillationen dar. Es wird die komplexe Struktur der aus den schweren und leichten Valenzbändern entstehenden sich vielfach überschneidenden Übergitter- Subbändern berechnet. Da diese komplexen Effekte üblicherweise nicht die Bloch-Oszillationen beeinflussen, untermauern diese Rechnungen die langläufige Annahme, das THz-Signal sei überwiegend leitungselektronischer Natur.

Die heterogene Zusammensetzung der Arbeit bedingt eine geringe methodische Überschneidung der einzelnen Kapitel, so dass der Anteil dessen, was sich in einem Grundlagenkapitel für den späteren Gebrauch aufbereiten ließe, recht klein ausfällt. Stattdessen wurde Wert darauf gelegt, in jedes der drei Sachkapitel allgemeinverständlich und auf anschauliche Weise einzuführen. Dazu dienen insbesondere die jedem dieser Kapitel vorangestellten Einführungen, die das Umfeld erläutern und Linie und Ziele vorgeben, bevor dann die eigenen Beiträge entwickelt werden. Dass sich dann zwischen den Themenkomplexen doch immer wieder querverweisen lässt, mag zusätzliche Synergieeffekte zum Verständnis der THz-Erzeugung freisetzen.

Themen, denen die Erwähnung nicht verwehrt werden sollte, die aber letztendlich nur angedacht worden sind und nicht direkt mit der THz-Erzeugung in Verbindung stehen, sind in den Anhang verbannt.

Im sofortigen Anschluss finden sich noch einige Bemerkungen zur Notation und Terminologie, die den Umgang mit der Arbeit erleichtern mögen.

1.1 Notation und Terminologie

Der Begriff „elektronisch“ wird in dieser Arbeit im Sinne „vom Elektron“ gebraucht und zeigt keine Beziehung zur Elektronik. „Elektronen“ bezeichnen die relevanten Bloch-Elektronen im Halbleiter, je nach Zusammenhang und Modell sind dabei auch die Löcher mit eingeschlossen. Geht die Unterscheidung nicht aus dem Kontext hervor, so heißt es präziser Leitungselektronen bzw. Ladungsträger. In der gesamten Arbeit ist $i = e/h$ für die Indizierung der Unterscheidung zwischen Leitungselektronen und Löchern reserviert ($e^e = -|e|$, $e^h = |e|$).

Es wurde versucht, überflüssige Anglizismen zu vermeiden. So sprechen wir statt von „Detuning“ durchgängig von „Verstimmung“, und meinen damit den Energiebeitrag, um welchen die Trägerwelle des optischen Pulses gegenüber der unrenormierten Bandkante verstimmt ist. Mit „Lokalisation“ ist eine bestimmte Basiseinheit einer periodischen Struktur im Ortsraum angesprochen, sei es ein Quantentopf in einem Übergitter oder ein Ein-Teilchen-Potenzial, dessen periodische Superposition das Viel-Teilchen-Potenzial darstellt. Der Begriff entspricht dem englischen „site“. Ist der englische Ausdruck bereits mit einer etablierten physikalischen Assoziation verknüpft, die bei der Übersetzung Gefahr läuft, verloren zu gehen, so ist die englische Terminologie in Klammern zusätzlich angegeben. Den Begriff „chirped pulses“ mit „gezirpten“ oder „gezwitscherten“ Pulsen zu übersetzen, ist hingegen wenig hilfreich, der englische Ausdruck wurde — nach Erklärung — in Anführungszeichen beibehalten.

„Evolution“ steht immer für die zeitliche Evolution.

Um das Lesen der Arbeit zu erleichtern, wurden Mammut-Wortkonstrukte — wann immer möglich — durch die Verwendung von Bindestrichen aufgelockert (z.B. Luttinger-Matrix-Hamilton-Operator).

Vektoren werden mit Vektorpfeilen gekennzeichnet (z.B. \vec{v}), wohingegen Matrizen fett geschrieben sind (z.B. \mathbf{H}); soll der Operatorcharakter einer Größe herausgestellt werden, so geschieht dies mit dem Dach (z.B. \hat{p}).

Oftmals sprechen wir kurz vom Strom und meinen damit die Ladungsstromdichte (für homogene, unendliche ausgedehnte Systeme ist nur die intensive Größe sinnvoll). Für die generelle Ladungsstromdichte steht \vec{J} ; \vec{J} dagegen wird für die THz-Stromdichte benutzt, wenn Stromdichtekomponenten anderer Frequenzbereiche außer Acht gelassen worden sind. Für prinzipielle Überlegungen kommt der Einteilchen-Strom \vec{j} zur Anwendung.

Die kalligraphischen Symbole \mathcal{E} und \mathcal{B} stehen für sowohl zeitlich als auch räumlich konstante elektrische bzw. magnetische Felder.

In der Voigt-Geometrie gekreuzter elektrischer und magnetischer Felder in Kapitel 3

ist der Sprachgebrauch für die Grenzfälle kurz der „elektrische“ bzw. der „magnetische“ Fall, womit der Fall ausschließlich eines elektrischen Feldes ($\mathcal{E} \neq 0; \mathcal{B} = 0$) respektive ausschließlich eines magnetischen Feldes ($\mathcal{B} \neq 0; \mathcal{E} = 0$) gemeint ist.

Kommt es in Überstrukturen bzw. durch ein angelegtes Magnetfeld in der Näherung effektiver Massen zur Ausbildung einer diskreten Quantenzahl additiv zu kontinuierlichen bzw. quasi-kontinuierlichen Quantenzahlen, so spricht man wegen der viel geringeren energetischen Breite im Vergleich mit den Kristallbändern von „Sub-“ oder „Minibändern“. Handelt es sich um prinzipielle Betrachtungen bzw. ist der Zusammenhang eindeutig, verwenden wir weniger schwerfällig den generellen Begriff des „Bandes“. Existieren Subbänder, so kann dies in den Bloch-Gleichungen die Anregung von Größen der Einteilchen-Dichtematrix zur Folge haben, die im Teilchenart-Index diagonal, in den anderen Quantenzahlen aber nicht-diagonal sind. Je nach Perspektive werden hierfür die Ausdrücke Inter-Subband- bzw. Intra-Band-Polarisation synonym verwandt.

Alle Formeln sind im cgs-System angegeben, um jedoch den Vergleich mit experimentellen Daten zu erleichtern, sind Zahlenwerte und Abbildung in SI-Einheiten angegeben.

Zitiert wird im Prinzip nach den drei Anfangsbuchstaben des ersten Autors (z.B. [And] für *L.C. Andreani, A. Pasquarello, and F. Bassani*), ist die Zuordnung nicht eindeutig, werden weitere Buchstaben hinzugezogen (z.B. [Bass] für *F. Bassani* im Gegensatz zu *G. Bastard*). In Ausnahmefällen ist durch Kleinbuchstaben auf den Vornamen hingewiesen (z.B. [xWu] für *X.-G. Wu* im Gegensatz zu *M.W. Wu*). Handelt es sich um mehrere Arbeiten des gleichen Erstautors, so markiert die Zahl im Anschluss an die Buchstabenkombination das Jahr der Erscheinung (z.B. [Lei99] für *A. Leitenstorfer et al. (1999)*), die zweite Zahl differenziert zwischen Artikeln des gleichen Erscheinungsjahres (z.B. [Alt83/2]).

Die Arbeit folgt den Regeln der neuen Rechtschreibung.

Kapitel 2

Grundlagen

Durch die Struktur der Arbeit begründet, handelt es sich bei dem Kapitel der Grundlagen weitestgehend um eine lose Zusammenstellung dessen, was in den Sachkapitel an mehr als einer Stelle von Nutzen sein kann. Vieles davon lässt sich in allgemeinen Physik-Lehrbüchern [LanII, LanIII, LanIX, Mah], Büchern zur Festkörper- [Cal, Mad, Zim] und speziell zur Halbleiterphysik [Ans, Fer], sowie zur Halbleiteroptik [Hau94, Peg, Sha] und zu Halbleiter-Heterostrukturen [Bast88, Ivc, Wei] finden und zeichnet sich nur in der durch die späteren Anwendungen motivierte Perspektive aus.

Wir erinnern kurz an die wesentlichen Eigenschaften eines Halbleiters, auf der im Weiteren alle Modelle aufbauen werden. Dazu gehören die durch die Energielücke getrennten Valenz- und Leitungsbander, die in Bandkantenähe im Volumenmaterial parabolisch genähert werden können (Abschn. 2.1), für die Valenzbander in Heterostrukturen aber komplexe Betrachtungen erfordern (Abschn. 5.4, 5.5).

Die einfachste Näherung dieser Bandstruktur ist ein Zwei-Band-Modell aus Leitungselektronen und Löchern. Die verwendete Basis ist dabei oft die des Kristallimpulses. In ihr beschreibt die Fröhlich-Kopplung die Wechselwirkung mit den optischen Phononen. All dies ist in Abschnitt 2.2 angerissen.

Da in dieser Arbeit vielfach die Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern betrachtet wird, sind alle Erläuterungen dazu im Abschnitt 2.3 zusammengefasst.

Abschnitt 2.4 beschreibt am System des asymmetrischen Quantentopfes eine konzeptionelle Idee zur THz-Erzeugung, die sowohl in Kapitel 3 als auch in Kapitel 5 die Anschauung unterstützt.

Abschnitt 2.5 erwähnt kurz gängige Methoden der THz-Spektroskopie und schlägt die Brücke zwischen der in den Modellen berechneten Größe der Stromes und der messbaren Abstrahlung.

2.1 Bandstruktur

Die Themen dieser Arbeit sind in der Halbleiteroptik angesiedelt, deren prominenter Vertreter der direkte III-V-Halbleiter Gallium-Arsenid (GaAs) ist. Von daher ist GaAs im Folgenden Gegenstand der Betrachtung, auch wenn viele der Befunde für eine weitaus größere Klasse zutreffen.

Halbleiter sind Materialien, bei denen das energetisch höchste vollständig besetzte Band vom ersten unbesetzten Band durch eine moderate Energielücke — im Gegensatz zu den Isolatoren, die eine große Energielücke besitzen — getrennt ist. Direkt nennt man einen Halbleiter, wenn im k -Raum das Minimum des Leitungsbandes mit dem Maximum des Valenzbandes zusammenfällt. Da oftmals der Photonimpuls vernachlässigbar ist (siehe Abschn. 2.3), eignen sich diese Materialien daher sehr gut zu optischen Untersuchungen um die Energielücke herum. Ziel ist es also, sowohl Leitungs- als auch Valenzband in der Nähe ihrer Bandkanten (um den Γ -Punkt im Zentrum der Brillouin-Zone herum) zu beschreiben. Der Charakter der Wellenfunktionen an diesem Γ -Punkt rührt von der Atomstruktur der zugrundeliegenden Elemente her und passt sich auch in der Terminologie atomistischen Bezeichnungen an (wobei man sich jedoch die Terminologie der vollen Rotationsgruppe auf die kubische Rotationsgruppe reduziert denken sollte): Man findet, dass die Leitungsband-Wellenfunktion s -artig ist (invariant unter kubischen Rotationen), also den „Bahndrehimpuls“ $L = 0$ trägt. Zusätzlich liegt noch eine zweifache Spinentartung vor. Zur Beschreibung der Leitungselektronen um die Bandkante benutzt man die Effektive-Masse-Näherung: Von einer wie auch immer gearteten Banddispersion behält man nur die Terme bis zur zweiten Ordnung in k , der auftretende Koeffizient wird aus dem Experiment bestimmt. Die Rücktransformation von $\hbar \vec{k} \implies \vec{p} \equiv -i\hbar \nabla$ führt dann auf einen effektiven Hamilton-Operator im Festkörper (ohne das periodische Potential), der dem eines freien Teilchens mit einer veränderten, einer „effektiven“ Masse gleicht. Dieser effektive Hamilton-Operator findet dann seine Anwendung in einer effektiven Schrödinger-Gleichung für die Einhüllende, wenn es darum geht, z.B. elektrische oder magnetische Felder oder Heterostrukturen zu inkorporieren.

Komplizierter liegt der Fall bei den Valenzbändern, deren dreifache Entartung am Γ -Punkt der „ p “-artigen Natur der Zustände zuzuschreiben ist. Aufgrund des Spins tritt wiederum eine zusätzliche zweifache Entartung auf. Ebenso wie in der Atomphysik [May] und Kernphysik [LanIII] kommt es aber im Valenzband zu Korrekturen des einfachen Bildes, wenn man die Spin-Bahn-Kopplung berücksichtigt. Dort hat die relativistische Korrektur der Spin-Bahn-Wechselwirkung zur Folge, dass weder der Bahndrehimpuls noch der Spin eine gute Quantenzahl darstellen, sondern dies nur

noch für den Gesamtdrehimpuls $\vec{J} \equiv \vec{l} + \vec{\sigma}$ gilt. Nach diesem werden die Eigenzustände im Weiteren klassifiziert. Aus den Orbitalzuständen mit $m = 0, \pm 1$ und den Spin-Zuständen mit $\sigma_z = \pm \frac{1}{2}$ lassen sich nun die Eigenzustände mit $J = \frac{3}{2}$, $J_z = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$ und $J = \frac{1}{2}$, $J_z = \pm \frac{1}{2}$ wie folgt konstruieren:

$$|\frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2}\rangle = |1, \pm 1\rangle |\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle \quad (2.1)$$

$$|\frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|1, \pm 1\rangle |\frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2}\rangle \mp \sqrt{2} |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle \right) \quad (2.2)$$

$$|\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\sqrt{2} |1, \pm 1\rangle |\frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2}\rangle \pm |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle \right) \quad (2.3)$$

Eine einfache Betrachtung [May] macht plausibel, dass die Energieverschiebung aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung unterschiedlich ist, je nachdem ob der Gesamtdrehimpuls $J = \frac{3}{2}$ oder $J = \frac{1}{2}$ beträgt. In GaAs ist das Valenzband zum Gesamtdrehimpuls $J = \frac{1}{2}$ um $\Delta = 340$ meV zu niedrigeren Energien hin abgespalten [Lando]. Dieses „Split-Off“-Band kann deshalb für die Betrachtung um die Energielücke herum getrost außer Acht gelassen werden. Im selben Sinne wie für die Leitungselektronen der Hamilton-Operator mit einer effektiven Masse verwandt wird, kann für die restlichen vierfach-entarteten Loch-Energien unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung der von Luttinger [Lut55, Lut56] vorgeschlagene, phänomenologische Hamilton-Operator dienen. Hier sind es die zwei Parameter γ_1 und γ_2 , die aus dem Experiment bestimmt, das Verhalten der Löcher an der Bandkante wiedergeben. In seiner sphärischen Form lautet der Luttinger-Hamilton-Operator

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) k^2 - 2\gamma_2 (\vec{J} \cdot \vec{k})^2 \right\} \quad , \quad (2.4)$$

wobei die Energie als Lochenergie $E_h = -E_v$ gerechnet wird. Dies ist die einfachste Form eines Hamilton-Operators, der quadratisch in k und invariant unter Drehungen ist und aus den Vektoren \vec{k} und \vec{J} aufgebaut werden kann. Dabei sollte man vor Augen haben, dass es sich bei den Komponenten J_i um 4×4 -Matrizen handelt. Wählt man die Quantisierungsachse von \vec{J} entlang des Wellenvektors \vec{k} , was hier im isotropen Fall (im Gegensatz zu den später zu betrachtenden Übergittern in Abschn. 5.4) immer möglich ist, so ist das Problem trivial diagonalisierbar, und die Energie-Eigenwerte lauten mit den Bezeichnungen m_J für die Eigenwerte des Gesamtdrehimpulses entlang der Quantisierungsachse J_z

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 - 2\gamma_2 m_J^2 \right) \quad . \quad (2.5)$$

Je nach Einstellung von $m_J = \pm\frac{3}{2}$ bzw $m_J = \pm\frac{1}{2}$ erhält also zwei zweifach entartete parabolische Bänder mit größerer

$$m_{hh} = \frac{m}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad (2.6)$$

oder kleinerer effektiver Masse

$$m_{lh} = \frac{m}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad (2.7)$$

(heavy/light hole).

Insgesamt ergibt sich damit für das Volumenmaterial GaAs die modellhafte Bandstruktur (Abb. 2.1): ein zweifach entartetes Leitungsband, jeweils ein zweifach entartetes Schwer- und ein zweifach entartetes Leicht-Loch-Band, die am Γ -Punkt ($\vec{k} = 0$) zusammenfallen und ein zu niedrigeren Energien abgespaltenes Band.

War es bis jetzt ausreichend, sich auf Gallium-Arsenid zu beschränken, so wird man bei der Betrachtung von Heterostrukturen, die aus der Welt der Bauelemente ebenso wenig wie aus dem physikalischen Grundlagenkosmos wegzudenken sind, den Rahmen nun geringfügig weiter fassen müssen. Diese Strukturen sind auf einer mesoskopischen Skala heterogen, d.h. auf mikroskopischer Ebene ist — zumindest theoretisch — die Kristallstruktur perfekt, auf einer größeren Skala sind aber unterschiedliche Materialien „zusammengeklebt“. Im besten Fall sind dies sehr ähnliche Halbleitermaterialien, die sich in ihrer Gitterstruktur und -konstante kaum von einander abheben, sich jedoch in ihrer Bandlücke unterscheiden. Aufgrund der mesoskopischen Skala tut man so, als liege in den einzelnen Schichten jeweils die Bandstruktur des Volumenmaterials (unendlich ausgedehnt) vor. Die durch die unterschiedlichen Bandlücken erzeugten Potenziale führen dazu, dass sich die Ladungsträger in den Schichtmaterialien

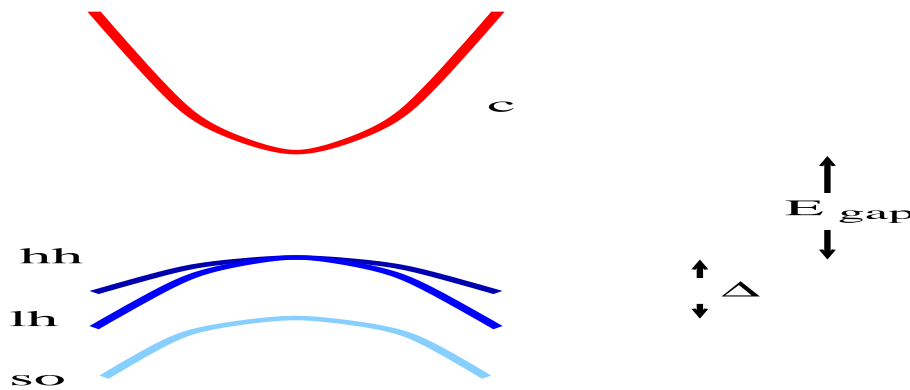


Abbildung 2.1: Bandstruktur Gallium-Arsenid, qualitativ

nicht homogen verteilen, sondern maßgeblich in den Potenzialtöpfen gefangen sind. Sind Elektronen und Löcher auf die gleichen Materialien eingeschränkt (der auch im Deutschen mittlerweile gebräuchliche Ausdruck für die Einschränkung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen ist „Confinement“) spricht man von Typ-I-Strukturen. Hier ist als wichtigster Repräsentant GaAs/Ga_xAl_{1-x}As für $0 < x < 0.4$ behandelt. Übersteigt der Al-Anteil 0.4, hat man es mit einem indirekten Halbleiter zu tun. Reiht man die unterschiedlichen Schichten genügend oft aneinander, so entstehen die sogenannten „Über-“ oder auch „Supergitter“, im Gegensatz zum mikroskopischen Kristallgitter sind diese Übergitter in guter Näherung periodisch auf makroskopischer Ebene (die makroskopische Probe besteht aus einer Aneinanderreihung einer Vielzahl mesoskopischer Schichten).

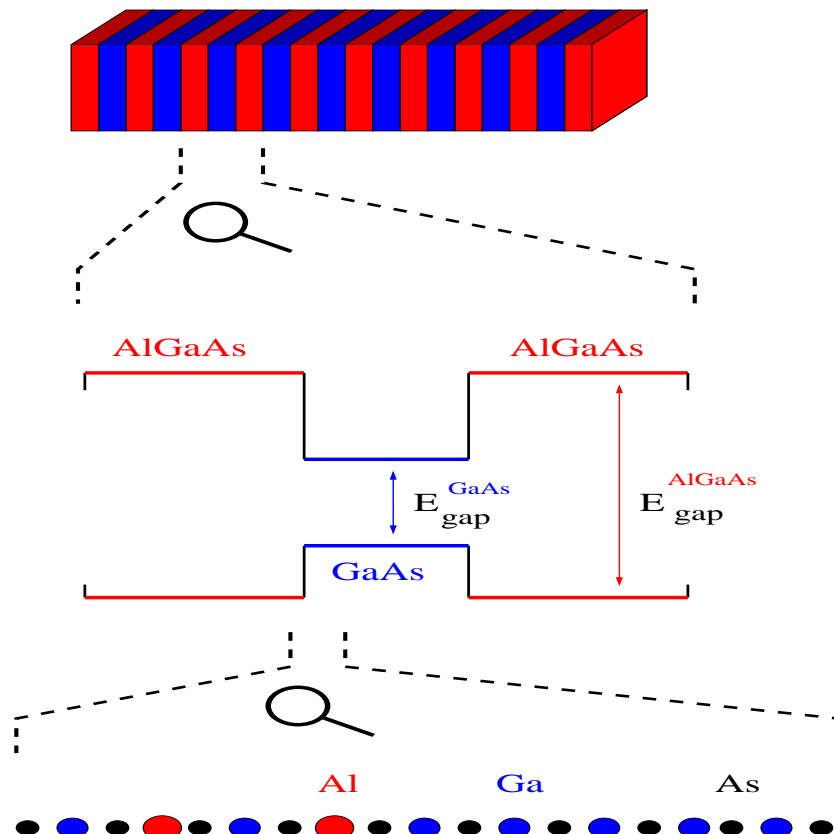


Abbildung 2.2: Skalenvielfalt: Supergitter, räumliche Darstellung (makroskopisch); Heterostruktur, idealisierte Energieverhältnisse (mesoskopisch); Kristallstruktur, stark idealisiert (mikroskopisch)

2.2 Elektronen und Phononen

Zunächst werden jetzt die Grundlagen der elektronischen Eigenschaften im Halbleiter zusammengefasst. Dabei stellt einem vor allem die im vorherigen Abschnitt dargelegte Valenzbandstruktur vor derart komplexe Probleme, dass man vielfach zu einer einfacheren Modellierung Zuflucht nimmt. Statt des luttingerschen Matrix-Hamilton-Operators benutzt man wie im Leitungsbandfall einen effektiven Hamilton-Operator für eine einzige effektive Masse, d.h. die komplizierte Valenzbandstruktur wird auf ein einziges Band mit parabolischer Dispersion reduziert. Für diese eine Art von Löchern in einem Zweiband-Modell (ein Leitungsband, ein Lochband) kann dann je nach Anwendung die Schwer- oder Leicht-Loch-Masse angenommen werden. Hier macht man sich die optischen Auswahlregeln zu Nutze: Aufgrund der Form der Bloch-Funktionen [Kan66] ist die Oszillatorstärke für den Schwer-Loch-Übergang dreimal stärker die für den Leicht-Loch-Übergang [Nak]; ebenso spielt hier die größere Zustandsdichte der schweren Löcher eine Rolle. Darüberhinaus gelten gewisse Auswahlregeln [Zak], je nachdem in welcher Art die Polarisation des Lichtes präpariert ist, so dass man gezielt darauf Einfluss nehmen kann, welche Art der Löcher man anregt.

In Kapitel 3 werden leichte Löcher betrachtet, da deren Zyklotronfrequenz in das experimentell zugängliche Frequenzfenster fällt [Bau] und von ähnlicher Größenordnung wie die der Elektronen ist, so dass es zu charakteristischen Schwebungen kommt. Da die deutlich größere Periodendauer der schweren Löcher der Beobachtung hingegen schlecht zugänglich ist, werden die schweren Löcher bei dieser Betrachtung ignoriert. In Kapitel 4 ist ein positiver Hintergrund angenommen, weil die Wechselwirkung von Teilchen unterschiedlicher Ladung mit einem klassischen Modell unverträglich ist. Dass dieser Hintergrund an der Dynamik nicht teilnimmt, spiegelt die große Trägheit schwerer Löcher wieder.

Inwiefern es gerechtfertigt ist, in der Diskussion der Bloch-Oszillationen von den schweren Löchern in Übergittern zu sprechen, bzw. ihnen den Vorzug zu geben, ist Gegenstand des Kapitels 5. Hier wird das Modell tatsächlich im komplexeren Luttinger-Formalismus analysiert, um die Annahme von schweren Löchern in einem Zweibandmodell zu rechtfertigen.

In einem Zweiband-Modell genügt es also, einfach von Löchern (h holes) zu sprechen. Diese werden um die Bandkante je nach ihrer Masse durch die entsprechende parabolische Dispersion $\epsilon_i(k)$ beschrieben, so dass hier der Hamilton-Operator in der zweiten Quantisierung mit den Erzeugungs- ($a_{\vec{k}}^{i\dagger}$) und Vernichtungsoperatoren ($a_{\vec{k}}^i$)

$$H_{e/h} = \sum_{\vec{k}i} \epsilon_i(k) a_{\vec{k}}^{i\dagger} a_{\vec{k}}^i \quad (2.8)$$

lautet. Dies ist der diagonale Anteil des Hamilton-Operators in der Basis ebener Wellen, die auf die Effektive-Masse-Näherung der Bloch-Funktionen zurückgeht. Die einleitenden Gedanken dieses Abschnitts werden ausschließlich in dieser Basis formuliert, wie sie auch in vielen Lehrbüchern zu finden [Hau94, Cal, Hak] sind. Erweist es sich als günstig, die Basis zu wechseln — wie etwas für die Geometrie gekreuzter Felder in Kapitel 3 — so lassen sich von hieraus dennoch viele allgemeine Befunde transferieren, so z.B. die Kopplung an die LO-Phononen.

An dieser Stelle ist ein Kommentar bezüglich des Spins angebracht. Bereits eingegangen wurde auf die Konsequenzen für die Bandstruktur und deren Aufspaltung in die Dispersion schwerer und leichter Löcher. Die damit verbundenen Auswahlregeln für die optischen Übergänge, die mit der Polarisierung des Lichts verknüpft sind, werden im Folgenden nicht weiter berücksichtigt. Die Kopplung des Spins an das Magnetfeld im Festkörper im Rahmen einer erweiterten Bloch-Theorie zu beschreiben ist schwierig, im Rahmen einer effektiven Schrödinger-Gleichung lautet der Beitrag zum Hamilton-Operator

$$H_s = g_s \frac{e\hbar}{2m_0c} \vec{\mathcal{B}} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \quad , \quad (2.9)$$

wobei es sich bei m_0 um die freie Elektron-Masse und bei g_s um den „freien“ gyromagnetischen Faktor handelt. Daher ist die sich ergebende energetische Aufspaltung je nach Spineinstellung für GaAs vernachlässigbar [Cal]. Bestätigt wird diese Einschätzung durch die experimentellen Daten in Form eines phänomenologischen g -Faktors [Lando]. Wir nehmen an, dass das Spektrum spinunabhängig ist; darüber hinaus sind alle in dieser Arbeit betrachteten Wechselwirkungen spindagonal. Damit ist der Spin allein auf einen Entartungsfaktor reduziert und für den Rest der Arbeit in die Summation impliziert, so dass wir über ihn kein Wort mehr verlieren werden.

Es gibt eine Vielzahl von Arbeiten, in denen der entscheidende Streumechanismus die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen ist, sie zumindest im Rahmen eines mittleren von den anderen Elektronen erzeugten Feldes (Hartree-Fock) zu berücksichtigen ist fast schon Standard. Dass dies hier dennoch nicht getan wird, liegt in dem speziellen Charakter der Modelle begründet: Im ersten Teil wird das Modell den niedrigen im Experiment verwendeten Dichten angepasst, und die Coulomb-Wechselwirkung deswegen als weniger wichtig erachtet; im Rahmen des klassischen Polaronmodells ist die Elektron-Elektron-Wechselwirkung enthalten, aufgrund der speziellen Anfangsbedingungen trägt sie jedoch nicht bei; und im dritten Teil dient die betrachtete Dynamik eher der Motivation der späteren Rechnungen, so dass wir uns mit einem illustrativen Niveau der Gleichungen bescheiden. Da die Elektron-Elektron-Wechselwirkung insbesondere die Absorption drastisch verändert (Exziton [Hau94]), sind die in der Arbeit präsentierten Absorptionsspektren (Abschn. 3.3,B)

eher zur Unterstützung der Anschauung gedacht denn zum direkten Vergleich mit dem Experiment.

Die Phononen stellen den für diese Arbeit relevanten Wechselwirkungsmechanismus. Die bisherigen Betrachtungen betrafen freie Elektronen im periodischen Potential des starren Kristallgitters. Nicht berücksichtigt wurde, dass dieses Ionengitter auch Freiheitsgrade der Bewegung besitzt, die in Schwingungen um die Mittellagen resultieren. Nach der Art ihrer Dispersionskurven unterteilt man diese phononischen Anregungen in akustische und optische Zweige. Da es das Ziel ist, die Phononen in die Halbleitroptik zu integrieren, die sich um die Bandkanten am Γ -Punkt abspielt, so ist auch hier das Verhalten für kleine k -Werte von Interesse, so dass eine Beschreibung durch ein Kontinuumsmodell möglich ist. Die Dispersionskurve der akustischen Anregungen zeigt hier ein lineares, den Ursprung der Brillouin-Zone schneidendes Verhalten, während die Variation der optischen Äste so gering ist, dass man sie allgemein vernachlässigt und einen konstanten Wert annimmt (GaAs: 36 meV). Dementsprechend unterscheidet sich auch die theoretische Modellierung: Die akustischen Phononen werden durch Dichtewellen beschrieben, die nur schwach über ein Deformationpotential mit den Elektronen koppeln. Obwohl diese Wechselwirkung also nicht die effektivste ist, kommt ihr aufgrund des Spektrums entscheidende Bedeutung bei sehr niedrigen Temperaturen zu, etwa bei der aktuell diskutierten Bose-Einstein-Kondensation in Exziton-Systemen [Ban00, omSchm]. Von den optischen Phononen rührt in polaren Halbleitern hingegen ein Polarisationsfeld $\vec{P}(\vec{x})$ her. Der longitudinale Anteil dieses Feldes tritt in direkte und daher starke Coulomb-Wechselwirkung mit den Elektronen:

$$H_{e/h-ph} = -\frac{1}{\epsilon_\infty} \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \frac{\nabla \vec{P}(\vec{x}) \rho(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \quad . \quad (2.10)$$

$\hat{\rho}$ bezeichnet dabei die elektronische Ladungsdichte, ϵ_∞ den Hintergrund der Valenzelektronen. In dieser Arbeit wird ausschließlich diese dominante, sogenannte „Fröhlich“-Kopplung berücksichtigt. Als integraler Bestandteil des Polaronmodells wird die klassische Formulierung in Kapitel 4 detailliert entwickelt. Hier beschränken wir uns auf den Ausdruck in der k -Darstellung, der aus der (zweiten) Quantisierung dieses Ansatzes resultiert [Hak]. Man erhält für die Kopplung an die Elektronen in den bosonischen Erzeugern b^\dagger und Vernichtern b , sowie deren fermionischen Pendanten für Elektronen und Löcher (wieder $a^{\dagger i}$ bzw. a^i)

$$H_{e/h-ph} = \sum_{\vec{k} \vec{q} i} \left(g_{\vec{q}} b_{\vec{q}} a_{(\vec{k}+\vec{q})}^{i\dagger} a_{\vec{k}}^i + g_{\vec{q}}^* b_{\vec{q}}^\dagger a_{(\vec{k}-\vec{q})}^{i\dagger} a_{\vec{k}}^i \right) \quad (2.11)$$

mit

$$g_{\vec{q}}^2 = \alpha \frac{4\pi\hbar (\hbar\omega_{LO})^{3/2}}{(2m)^{1/2} q^2 V} \quad (2.12)$$

und der dimensionslosen Polaronkonstante

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{m}{2\hbar\omega_{LO}} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad . \quad (2.13)$$

Abschließend sei noch auf die Sonderrolle der Phononen in den dynamischen Gleichungen hingewiesen. Die dynamischen Gleichungen der Komponenten der Einteilchen-Dichtematrix erhält man durch Anwendung der Liouville-Gleichung, wobei Teile des Hamilton-Operators soeben vorgestellt worden sind, und der Ankopplung von externen Feldern der nächste Abschnitt gewidmet ist. Im Gegensatz zu den klassischen Feldern führt die Wechselwirkung der Elektronen mit den quantisierten Phononen auf eine unendliche Hierarchie von Gleichungen (Ankopplung immer höherer Dichtematrixkomponenten). Auf den notwendigen Abbruch dieser Hierarchie wird in 3.4 eingegangen werden.

2.3 Die Kopplung elektro-magnetischer Felder

In den verschiedenen Modellen dieser Arbeit werden eine Reihe von externen Feldern an die Elektronen gekoppelt. Um welche Felder es sich dabei handelt und wie die entsprechenden Kopplungen formuliert werden, ist hier kurz zusammengestellt. Wie der Name schon sagt, wird die Halbleiteroptik — zumindest gedanklich — nicht ohne ein optisches, also elektro-magnetisches Feld mit einer Frequenz in der Umgebung des sichtbaren Lichts auskommen. Werden (semi-) klassische Modelle zur qualitativen Illustration herangezogen (Abschn. 3.1, 4, 5.1), so taucht das optische Feld zwar nicht in den Gleichungen auf, man muss sich jedoch die Ladungsträger von ihm erzeugt denken (was z.B. die Ladungsneutralität zur Folge hat). Bei hochkohärenten, intensiven Lasern, derer sich die Halbleiterspektroskopie bedient, fallen die quantenstatistischen Effekte so gering aus, dass die Annahme eines klassischen Lichtfeldes gut gerechtfertigt ist.

Insgesamt wird die Wechselwirkung der Ladungsträger mit den Feldern (die alle klassisch betrachtet werden) durch die minimale Kopplung formuliert

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} - \frac{e\vec{A}(\vec{r}, t)}{c} \right]^2 + e\phi(\vec{r}, t) \quad . \quad (2.14)$$

Den intrinsischen Felder, die vom „Verkleben“ unterschiedlicher Materialien in Heterostrukturen herrühren, wird — wie bereits besprochen — mit einer phänomenologischen Potenzialstruktur genüge getan, sie werden nicht fundamental betrachtet (Kapitel 5).

Das von außen angelegte Magnetfeld soll über die Probenabmessung als räumlich homogen angenommen werden und zeitlich konstant sein. Weshalb in Kapitel 3 für ein Magnetfeld in z -Richtung die asymmetrische Landau-Eichung $\vec{A} = x\mathcal{B}\vec{e}_y$ gewählt ist, wird in der konkreten Diagonalisierung in gekreuzten Feldern deutlich (Abschn. 3.2). Ebenso räumlich homogen und zeitlich konstant wird das elektrische Feld angenommen. Es ist entweder über Kontakte an der Probe angelegt (Kondensatorprinzip) oder rührt von der intrinsischen Ladungsträgerverarmung an der Oberfläche her. Denken wir es uns generell in x -Richtung angelegt, muss auf den Vektorcharakter nicht weiter eingegangen werden. Da bei einem räumlich und zeitlich konstanten elektrischen Feld die Definitionen von longitudinal und transversal nicht greifen, ließe sich sowohl die Verwendung eines ortsabhängigen Potenzials der Form

$$\phi(\vec{r}) = -\mathcal{E}x \quad (2.15)$$

als auch der Ausdruck durch ein zeitabhängiges Vektorpotenzial

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = -\vec{e}_x \mathcal{E}t \quad (2.16)$$

in Erwägung ziehen. Oftmals wird die Formulierung über ein ortsabhängiges Potenzial vorgezogen, wenn der Term des elektrischen Feldes diagonalisiert werden soll, da somit die Basis zeitunabhängig bleibt. In dieser Arbeit wird ausschließlich diese Formulierung verwendet. In der Voigt-Geometrie gelingt damit die exakte Diagonalisierung des Einteilchen-Problems (Abschn. 3.2). Für ein klassisches Modell ist die Frage müßig und im Falle der Bloch-Oszillationen wird dadurch die Trennung von Zener-Tunneln zwischen den Bändern und den Drifttermen innerhalb der Bänder sofort deutlich. Der Vektorpotenzial-Ansatz zur Beschreibung von Bloch-Oszillationen geht auf Kittel [Kit] zurück, diskutiert wird er in [Kri, Ross98]

Dass die Kopplung des Lichtfeldes letztlich auch diese Form hat, ist jedoch keinesfalls geschickter Wahl zu verdanken, sondern nur im Rahmen der Dipol-Näherung gestattet. Vom prinzipiellen Standpunkt lässt sich der transversale Charakter des Lichtfeldes nicht mit einer longitudinalen Formulierung durch ein Potenzial vereinbaren. Dies ist nur erlaubt, weil ein räumlich homogen angenommenes Feld seine Transversalität einbüßt. Dass von räumlichen Modulationen abgesehen werden kann, liegt an großen Wellenlänge des Lichtfeldes gegenüber den Abmessungen der Elementarzelle, womit einhergeht, dass auch der Photonimpuls vernachlässigt werden kann. In dieser „Dipolnäherung“ ist die Kopplung

$$H_L = -eE(t)x \quad . \quad (2.17)$$

Angewandt auf den Halbleiter sind nur die resonanten Interband-Terme von Bedeutung, so dass die Formulierung in der Kristallimpuls-Darstellung schließlich

$$H_L = E(t) \sum_{\vec{k}} \left(d_{DM} a_{\vec{k}e}^\dagger a_{-\vec{k}h}^\dagger + h.c. \right) \quad (2.18)$$

lautet, wobei das optische Matrixelement d_{DM} als Konstante angenommen wird. Die typischerweise beschriebene Pulsform $E(t)$ besteht dabei aus einer Trägeroszillation $\cos(\omega t)$ und einer langsam veränderlichen Einhüllenden $E_0(t)$.

Die gleichen Argumente gelten auch für das durch den Freien-Elektronen-Laser erzeugte THz-Wechselfeld $E(t)$ in Anhang B.

2.4 Das Drei-Niveau-System

Für eine Klasse der — in der Einleitung erwähnten — Systeme (Bloch-Oszillationen, Doppel- und Einzelquantentopf, Voigt-Geometrie) ebenso wie für die Stark-Wellenpakete der Atomphysik [Kra], die nachweislich zu THz-Erzeugung taugen, kann das Drei-Niveau-System des asymmetrischen Doppelquantentopfes [kLeo91, Lur, Ros92] paradigmatisch stehen. Um seiner Überschaubarkeit willen soll es hier einleitend dazu dienen, die Gedanken herauszuarbeiten, die uns später innerhalb komplizierterer Modelle und ausladender Indizierung wiederbegegnen werden. Wir folgen dabei der Linie, wie sie in [Nus94, Luo, Sha] dargestellt sind.

Der asymmetrische Doppelquantentopf (asymmetric coupled quantum well) besteht aus zwei unterschiedlich breiten Quantentöpfen, die durch eine Barriere getrennt sind (Abb. 2.3, links). Die unterschiedliche Breite der Töpfe bedingt unterschiedliche Spektren der isolierten Einzeltöpfe. Ein zusätzlich angelegtes elektrisches Feld dient dazu, die Energieeigenwerte der Töpfe gegeneinander zu verstimmen (in der Skizze durch die Verkipfung angedeutet). Für die schweren Löcher ist die Barriere zu dick, als dass es zu einer relevanten Kopplung der Töpfe käme, der im Folgenden betrachtete Zustand ψ_3 ist im breiten Topf lokalisiert. Stimmt man das elektrische Feld so, dass der resonante Fall entsteht, in dem die leitungselektronischen Energieeigenwerte im dünnen und im breiten Topf zusammenfallen, so erstrecken sich die dazugehörigen Wellenfunktionen über beide Töpfe. Es handelt sich um Eigenzustände des Doppelquantentopfes. Transferiert man das Ergebnis für den symmetrischen Doppelquantentopf ohne Feld, so kann man näherungsweise annehmen, dass die Eigenzustände durch die symmetrische ψ_1 bzw. antisymmetrische ψ_2 Überlagerung der — reellen — Einzeltopf-Wellenfunktionen konstruiert werden können

$$\psi_1 = \psi_{ww} + \psi_{nw} \quad , \quad (2.19)$$

$$\psi_2 = \psi_{ww} - \psi_{nw} \quad . \quad (2.20)$$

ψ_{ww} beschreibt die im breiten Topf (wide well) lokalisierte Wellenfunktion, ψ_{nw} steht für den Zustand im dünnen Topf (narrow well). Die dazugehörigen neuen Energieeigenwerte E_1, E_2 des Doppelquantentopfes sind durch die Abstoßung (anticrossing) der Niveaus verschieden, der Energieunterschied ist mit $\hbar\omega_{12} = E_2 - E_1$ bezeichnet. Ein kurzer Laserpuls der Trägerfrequenz ω_{ww} kann nun ein Loch im Zustand ψ_3 (im breiten Topf lokalisiert) und durch seine energetische Breite einen elektronischen Zustand in der Überlagerung der Eigenzustände ψ_1 und ψ_2 anregen:

$$\psi(t) = \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \quad (2.21)$$

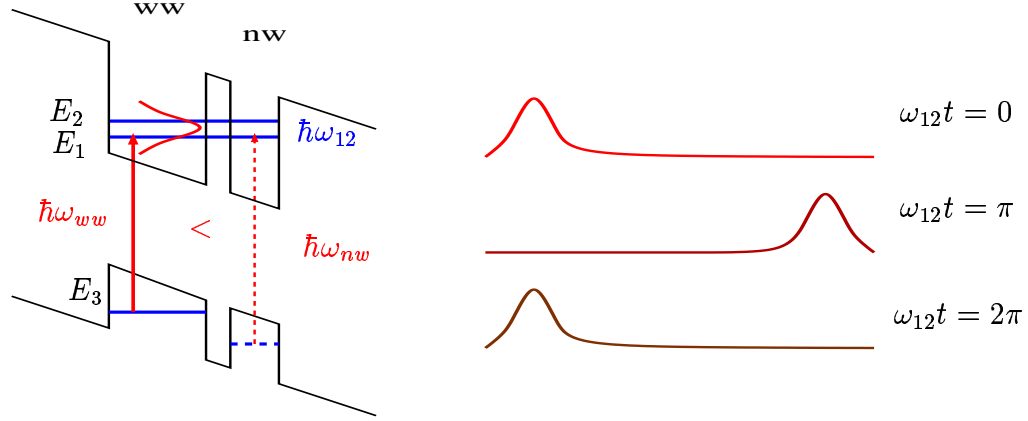


Abbildung 2.3: Szenario im asymmetrischen Doppelquantentopf (links); räumliche Oszillationen eines Wellenpaketes (rechts)

Dieses Wellenpaket ist keine stationäre Lösung der Schrödinger-Gleichung, vielmehr wird sich die aus ihr resultierende Aufenthaltswahrscheinlichkeit zeitlich verändern:

$$|\psi(t)|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\psi_1\psi_2 \cos(\omega_{12}t) \quad , \quad (2.22)$$

das Wellenpaket oszilliert mit der durch den Unterschied der Energie-Eigenwerte bestimmten Frequenz. Das Einsetzen der Einzeltopf-Wellenfunktion zeigt, dass mit den zeitlichen Oszillationen eine räumliche Bewegung des Wellenpaketes verbunden ist

$$|\psi(t)|^2 = \psi_{ww}^2 + \psi_{nw}^2 + (\psi_{ww}^2 - \psi_{nw}^2) \cos(\omega_{12}t) \quad (2.23)$$

(Abb. 2.3, rechts), solange seine Kohärenz erhalten bleibt. Dass das schwere Loch lokalisiert ist, sich die negative Ladung des Elektron aber bewegt, resultiert in einem zeitlich veränderlichen Dipolmoment bzw. einem oszillierenden Ladungsstrom. Die Energieunterschiede in den gängigen Topfstrukturen erzeugen THz-Oszillationen.

Zusammenfassend lassen sich von diesem Modell die folgenden Forderungen an ein System, von dem man THz-Oszillationen erwarten darf, abstrahieren: eine diskrete Energiestruktur; ein kurzer Puls, so dass dessen energetische Breite die Anregung von Wellenpaketen ermöglicht. Eventuell müssen Auswahlregeln, die der Anregung von Wellenpaketen im Weg stünden, gebrochen werden.

Bei den Wellenpaketen handelt es sich um Überlagerungen stationärer Lösungen zu verschiedenen der diskreten Energie-Eigenwerte. Daraus folgen Oszillationen des Wellenpaketes mit der Differenzfrequenz der Energieunterschiede. Zur Beobachtbarkeit der THz-Strahlung schließlich muss die Kohärenz des Wellenpaketes zumindest über den Zeitraum einer Periodendauer erhalten sein.

2.5 Terahertz-Spektroskopie

Da die Arbeit der THz-Erzeugung gewidmet ist, werden hier ausschließlich die experimentellen Gegebenheiten der THz-Emission bzw. Detektion angerissen, für die anderen gängigen experimentellen Methoden der Halbleiteroptik, die natürlich in der Nachbarschaft der hier behandelten Systeme und Modelle ebenfalls ihre Anwendung finden, sei jedoch auf die Literatur verwiesen [Sha, Dem, Bub].

Da die Effizienz der THz-erzeugenden Prozesse relativ gering ist, reicht eine Dipolnäherung aus, um die Eigenschaften des Strahlungsfeldes zu beschreiben. Die transversale Fernfeld-Näherung des emittierten Feldes einer bewegten Ladung ist dann [LanII]:

$$\vec{E}_{em\perp} = -\frac{1}{c^2} \frac{\ddot{\vec{d}}}{r} = -\frac{1}{c^2} \frac{\dot{\vec{j}}}{r} \quad (2.24)$$

wobei der Ladungsstrom \vec{j} und das Dipolmoment des Teilchens \vec{d} über die Beziehung $\vec{j} = \dot{\vec{d}}$ miteinander verknüpft sind. Durch die kohärente Anregung mit ultrakurzen optischen Laserpulsen gelingt es, zwischen der Bewegung der individuellen Ladungsträgern eine Kohärenz in Form einer festen Phasenbeziehung zu etablieren. Wie es hoher Experimentierkunst gelingt, diese Kohärenz auszunutzen und eine Geometrie zu finden, in der sich die individuellen Dipole aufgrund ihrer verzögerten Anregung konstruktiv zu einem makroskopischen Signal addieren, ist z.B. in [Gor00/1, Lei00] näher ausgeführt.

Für die Betrachtungen dieser Arbeit entnehmen wir daraus, dass es genügt, den Strom im Halbleiter (genauer dessen zeitliche Ableitung) zu berechnen, um Aussagen über das THz-Signal treffen zu können.

Auf zwei Arten von Detektoren wird hier näher eingegangen [Gor00/1]: Antennen-Detektoren und elektro-optische Detektoren.

Die Antennen-Detektion-Technik geht auf Auston und Mourou [Mou, Aus] zurück. Zentraler Bestandteil ist dabei eine photoleitende Dipolantenne. Der Photoleiter zeichnet sich dadurch aus, dass er unbestrahlt einen sehr großen Widerstand besitzt, dieser jedoch rapide um mehrere Größenordnungen abfällt, sobald durch einen Femtosekunden-Laserpuls Ladungsträger in ihm erzeugt werden. Für ein kurzes Zeitintervall wird das Element leitend, so dass das momentane elektrische Feld (THz-Feld) eine Ladungstrennung bewirkt, die über die Antennenarme einen messbaren Strom auslöst. Für den Fall, dass die laserinduzierte Leitfähigkeit nur kurz ist im Vergleich zu den Veränderungen im THz-Signal, kann durch wiederholte Laseranregung das THz-Signal zeitlich aufgelöst werden.

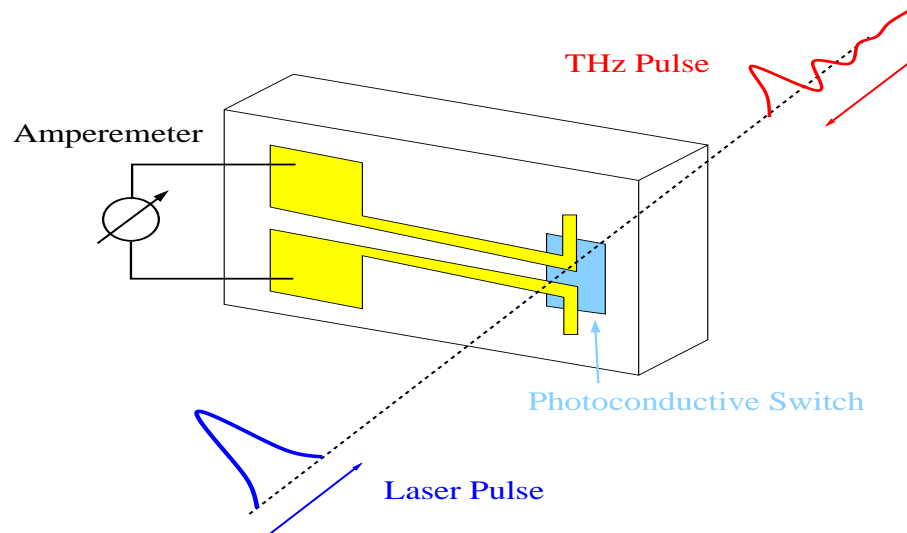


Abbildung 2.4: THz-Antennen-Spektroskopie

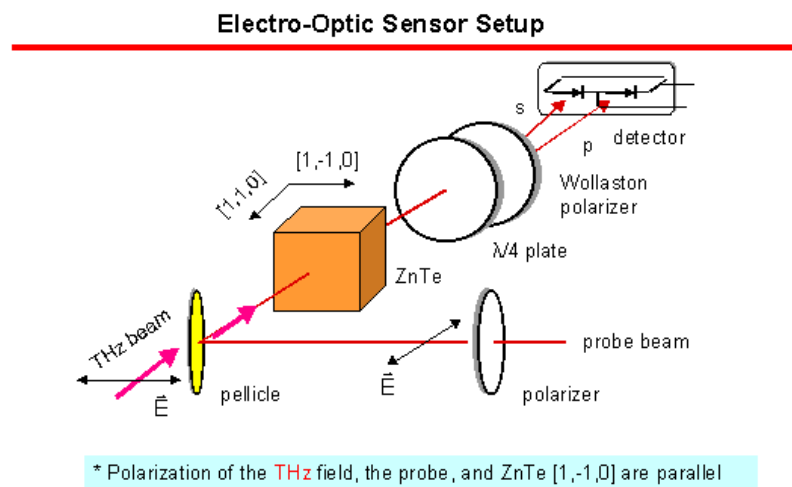


Abbildung 2.5: Elektro-Optische Detektion [Zha98]

Bei der elektro-optischen Detektion findet die Tatsache Anwendung, dass es Materialien gibt, deren optische Eigenschaften abhängig sind vom elektrischen Feld, dem sie ausgesetzt sind. Das THz-Signal dreht durch den Pockels-Effekt [Sal] die Polarisation eines optischen Strahls in nichtlinearen und doppelbrechenden Materialien. Da diese Drehung proportional der Größe und Polarisation des THz-Signales ist, misst man über die Detektion der Polarisation des optischen Pulses direkt das THz-Signal. Ist der THz-Puls lang gegen den optischen Puls ergibt die Wiederholung wiederum eine zeitlich aufgelöste Messung.

Kapitel 3

Stromkinetik in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der THz-Strahlung in einem Volumenmaterial, das zueinander senkrechten elektrischen und magnetischen Feldern ($\mathcal{E} \perp \mathcal{B}$) ausgesetzt ist. Eine solche Anordnung trägt den Namen Voigt-Geometrie. Zwei Fragen stehen dabei im Zentrum der Diskussion: (i) Wie kommt es in der Voigt-Geometrie zu THz-Oszillationen? (ii) Wie lassen sich die in dieser Geometrie experimentell beobachteten langen Relaxationszeiten erklären?

Um den Mechanismus der THz-Emission herauszuarbeiten, kommt es uns nun zugute, am asymmetrischen Doppelquantentopf (Abschn. 2.4) bereits die notwendigen Ingredienzen aufgezeigt zu haben. Interessanterweise ist es das Zusammenspiel der beiden Felder, das in der Voigt-Geometrie zum Erfolg führt. Beim Anlegen allein eines elektrischen Feldes kommt es immerhin noch zu einem breitbandigen THz-Signal - wenn auch nicht zu wohldefinierten Oszillationen. Im magnetischen Fall wartet man vergeblich auf Abstrahlung. Das elektrische Feld wird als der Symmetriebrecher identifiziert werden, so dass die Auswahlregeln des magnetischen Falles nicht mehr greifen und durch kurze Laserpulse Wellenpakete erzeugt werden können. Das magnetische Feld wird dagegen für den diskreten Anteil des Spektrums verantwortlich sein, so dass die THz-Strahlung von der wohldefinierten Zyklotronfrequenz dominiert wird. Wichtig für eventuelle Anwendungen ist hier, dass die Variation des Magnetfeldes ermöglicht, die Frequenz der Strahlung durchzustimmen.

Experimentelle Beobachtungen [Som94, Som96, Bau] zeigen, dass die Relaxationszeiten in der Voigt-Geometrie sehr groß sind, unerwartet groß, wenn man von den Er-

fahrungen ohne angelegte Felder extrapoliert. Unsere Aufmerksamkeit gilt daher dem dominanten die Kohärenz zerstörenden Prozess der LO-Phononstreuung. Ihm wird mit der Auswertung von quantenzahlabhängigen Lebensdauern Rechnung getragen. Die quantenmechanisch berechneten Lebensdauern bestätigen den beobachteten Abfall der THz-Oszillationen auf einer Pikosekunden-Zeitskala. Offensichtlich haben das diskrete Spektrum und die Lokalisierung der Wellenfunktionen durch das magnetische Feld zur Folge, dass das Streuverhalten sich stark von dem ohne angelegte Felder unterscheidet. Insbesondere das komplexe Zusammenspiel zwischen Anregungsbedingungen und den verschiedenen Relaxationszeiten sowie die Relaxationszeiten selbst sind innerhalb eines simplen klassischen Modells mit einem konstanten Dämpfungsterm nicht deduzierbar.

Nichtsdestoweniger schärft die klassische Betrachtung in Abschnitt 3.1 die Intuition für die komplexeren quantenmechanischen Rechnungen. An diese klassischen Anschauung lassen sich die späteren Ergebnisse dann rückkoppeln, Analogien begreifbar machen und die Abweichungen klar benennen.

Das quantenmechanische Problem wird in Abschnitt 3.2 in Angriff genommen, indem zunächst eine dem Problem angemessene Basis eingeführt wird. Es wird sich dabei im Wesentlichen um die Darstellung in den Eigenfunktionen eines verschobenen Oszillators handeln. Wie noch des Öfteren so zeigt sich auch hier die Voigt-Geometrie als Zwitterwesen zwischen dem elektrischen und dem magnetischen Extremalfall. In ihr gelingt die Diagonalisierung des Einteilchen-Hamilton-Operators samt der Terme für die beiden konstanten Felder.

Ausgehend von der üblichen Kristallimpuls-Darstellung (k -Darstellung) werden dann die restlichen Kopplungen in die neue Basis übersetzt werden müssen. In Abschnitt 3.3 geschieht dies für die Kopplung des Lichtfeldes. Besondere Beachtung finden dabei die instantane Polarisierung [Yab, Chu, Pla, Kuz93] und die Aufhebung der magnetischen Auswahlregeln [Bass].

Die Fröhlich-Kopplung mit den LO-Phononen wird in Abschnitt 3.4 in der neuen Basis formuliert. Mit Fermis goldener Regel ergeben sich die Übergangswahrscheinlichkeiten, aus denen man dann die Relaxationszeiten erhält. Variiert man die Felder, so lässt sich an Hand dieser Relaxationszeiten gut nachvollziehen, wie die aus dem magnetischen Fall bekannten Magneto-Phonon-Resonanzen [War, Barn, Vau, Mur, xWu, Hai] durch das elektrische Feld ausgeschmiert werden.

Sehr plausibel wird das Verhalten der Relaxationszeiten durch die Betrachtung der lokalen Zustandsdichte, die Abschnitt 3.5 füllt. Dort lässt sich der Übergang von den Resonanzen im magnetischen Fall über die Situation in der Voigt-Geometrie bis hin zum elektrischen Fall, der den Franz-Keldysh-Effekt widerspiegelt [Fra, Kel], nach-

vollziehen.

In Abschnitt 3.6 werden schließlich die kinetischen Gleichungen formuliert. Um die Menge der Dichtematrixelemente, deren zeitliche Evolution berechnet werden müssen, im Zaum zu halten, wird dazu ein Näherungsschema eingeführt, das auf den Eigenschaften der optischen Übergänge, wie sie in Abschnitt 3.3 dargestellt wurden, beruht.

Das Modell wird in Abschnitt 3.7 im Hinblick auf THz-Oszillationen ausgewertet. Dort wird ein Ausdruck für den THz-Strom abgeleitet. Ebenso findet man in diesem Abschnitt dessen numerischen Auswertung sowie Interpretation.

Die Resultate dieses Kapitels wurden in [Mein00/1, Mein00/2] veröffentlicht.

3.1 Klassische Bewegung in gekreuzten Feldern

Um den Rahmen dessen abzustecken, was eine spätere quantenmechanische Betrachtung leisten kann, ist es hilfreich, kurz die klassischen Befunde über die Bewegung eines Teilchens in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern zu rekapitulieren. Es wird ein stokescher Reibungsterm proportional der Geschwindigkeit angenommen und seine Stärke wird durch die Dämpfungskonstante $\tilde{\gamma}_i$ beschrieben. Damit lautet die Newton-Gleichung

$$m_i \ddot{r}_j^i = e^i \left(\sum_{kl} \epsilon_{jkl} \frac{\dot{r}_k^i}{c} B_l + E_i \right) - \tilde{\gamma}_i \dot{r}_j^i \quad . \quad (3.1)$$

m_i und e^i stehen für Masse und Ladung des Teilchens, B und E bezeichnen das magnetische bzw. elektrische Feld, der Index j kennzeichnet die jeweilige Vektorkomponente und ϵ_{jkl} das Levi-Civita-Symbol. Die Lichtgeschwindigkeit ist mit c abgekürzt. Beschränkt man sich auf konstante Felder und die Voigt-Geometrie mit der Orientierung des magnetischen Feldes in z -Richtung sowie des elektrischen in x -Richtung (siehe Abb. 3.1), so nimmt die Gleichung mit der komplexen Definition

$$z = v_x + iv_y \quad (3.2)$$

die bequeme Form ($\gamma_i = \tilde{\gamma}_i/m_i$)

$$\dot{z}^i = (-i\sigma^i \omega_c^i - \gamma_i) z^i + \sigma^i \vartheta^i \quad (3.3)$$

an, wobei

$$\omega_c^i = \frac{|e|\mathcal{B}}{cm_i} \quad (3.4)$$

die Zyklotron-Frequenz und

$$\vartheta^i = \frac{|e|\mathcal{E}}{m_i} \quad (3.5)$$

das analog definierte elektrische Pendant dazu ist. σ^i bezeichnet die Vorzeichenfunktion der Ladung ($\sigma^e = -1, \sigma^h = 1$). Da die Lösung dieser Gleichung in vielen Lehrbüchern durchexerziert ist [LanII], beschränken wir uns hier darauf, die Lösungen anzugeben. Und auch dies tun wir nicht in voller Allgemeinheit, sondern wählen stattdessen die Anfangsbedingungen: $r_x(0) = r_y(0) = 0$ und $v_x(0) = v_y(0) = 0$. Damit lauten die Gleichungen:

$$v_x^i(t) = \left[-\frac{\sigma^i \gamma_i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^{i2}} \cos \omega_c^i t + \frac{\sigma^i \omega_c^i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^{i2}} \sin \omega_c^i t \right] e^{-\gamma_i t}$$

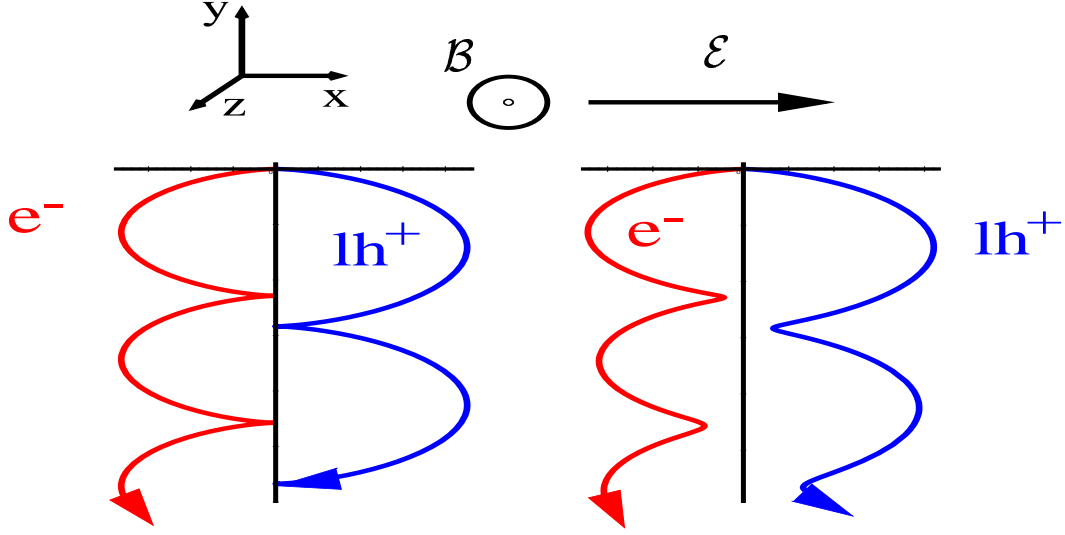


Abbildung 3.1: Zeitliche Evolution der Koordinate für Elektronen und leichte Löcher; ohne Dämpfung (links), gedämpft (rechts)

$$+ \frac{\sigma^i \gamma_i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \quad , \quad (3.6)$$

$$v_y^i(t) = \left[\frac{\omega_c^i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \cos \omega_c^i t + \frac{\sigma^i \gamma_i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \sin \omega_c^i t \right] e^{-\gamma_i t} - \frac{\omega_c^i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \quad . \quad (3.7)$$

Für die Koordinaten ergibt sich daraus

$$r_x^i(t) = - \left[\frac{\gamma_i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \left(\frac{-\sigma^i \gamma_i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} (\cos \omega_c^i t - 1) + \frac{\sigma^i \omega_c^i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \sin \omega_c^i t \right) + \frac{\sigma^i \omega_c^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \left(\frac{\omega_c^i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} (\cos \omega_c^i t - 1) + \frac{\gamma_i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \sin \omega_c^i t \right) \right] e^{-\gamma_i t} + \frac{\sigma^i \gamma_i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} t \quad (3.8)$$

$$r_y^i(t) = - \left[\frac{\gamma_i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \left(\frac{-\omega_c^i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} (\cos \omega_c^i t - 1) + \frac{\gamma_i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \sin \omega_c^i t \right) - \frac{\sigma^i \omega_c^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \left(\frac{-\sigma^i \gamma_i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} (\cos \omega_c^i t - 1) + \frac{\sigma^i \omega_c^i \vartheta^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \sin \omega_c^i t \right) \right] e^{-\gamma_i t} - \frac{\omega_c^i}{\gamma_i^2 + \omega_c^2} \vartheta^i t \quad . \quad (3.9)$$

Daneben ist es im Hinblick auf den quantenmechanischen Fall, in den eine klassische Dämpfung ohnehin nicht hinüberzuretten ist, hilfreich auf eine Dämpfung zu verzichten. Man erhält

$$v_x^i(t) = \frac{\sigma^i \mathcal{E} c}{\mathcal{B}} \sin \omega_c^i t \quad , \quad (3.10)$$

$$v_y^i(t) = \frac{\mathcal{E} c}{\mathcal{B}} \cos \omega_c^i t - \frac{\mathcal{E} c}{\mathcal{B}} \quad (3.11)$$

und

$$r_x^i = \frac{\sigma^i \mathcal{E} c}{\omega_c^i \mathcal{B}} (\cos \omega_c^i t - 1) \quad , \quad (3.12)$$

$$r_y^i = \frac{\mathcal{E} c}{\omega_c^i \mathcal{B}} \sin \omega_c^i t - \frac{\mathcal{E} c}{\mathcal{B}} t \quad . \quad (3.13)$$

In diesen Ausdrücken springen nun zwei Beobachtungen sofort ins Auge: Erstens sind die Amplituden der Geschwindigkeiten unabhängig von der Masse, und zweitens sind, während die Oszillationsfrequenzen massenabhängig sind, die konstanten (d.h. nicht-oszillierenden) Terme nicht nur unabhängig von der Masse, sondern auch vom Ladungsvorzeichen.

Betrachten wir die Evolution der Koordinate (Abb. 3.1), so ist der zweite Befund sofort offensichtlich: Abgesehen vom oszillatorischen Verhalten bewegen sich Teilchen beider Ladungssorten in die gleiche Richtung, was bei Metallen ausgenutzt wird, um mittels des Hall-Effektes die Majoritätsladungsträger zu bestimmen [Kop]. Die Dämpfung bewirkt hierbei eine Trennung der unterschiedlichen Teilchensorten in x -Richtung auch auf makroskopischer Skala, eine Trennung also, die über periodischen Oszillationen hinausgeht. In Abbildung 3.1, rechts, ist der Beginn dieser Entwicklung dargestellt, die Zykloiden erreichen nicht mehr die y -Achse. Insgesamt ist zu beobachten, dass sich im gedämpften Fall die Asymmetrie in den Massen nicht nur in der Frequenz der oszillatorischen Anteile niederschlägt, sondern sowohl deren Amplituden als auch die nichtoszillatorischen Anteile beeinflusst.

Schön zu sehen ist in Abbildung 3.2, links, obige Beobachtung für den ungedämpften Fall, dass die Amplituden massenunabhängig sind. Ebenso deutlich sichtbar ist hier das Schwebungsverhalten aufgrund der unterschiedlichen Zyklotronfrequenzen. Rechts hingegen wird die Dämpfung sehr deutlich. Die makroskopische Trennung ist hier daran abzulesen, dass die Ströme für große Zeiten nicht verschwinden, sondern sich einem konstanten, von Null verschiedenen Wert nähern, während gleichzeitig die Oszillationen mehr und mehr verblassen. Dies wird noch greifbarer in der parametrischen Darstellung (Abb. 3.3). Im ungedämpften Fall links zeigen sich deutlich die

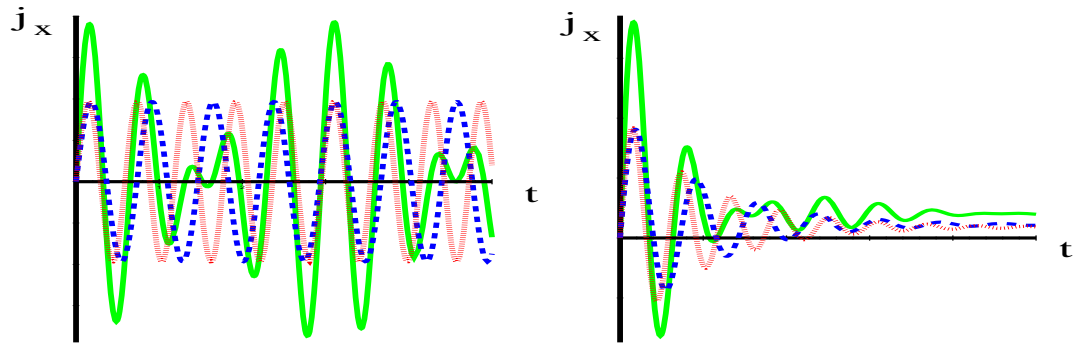


Abbildung 3.2: Zeitliche Evolution des Stromes in x -Richtung; Elektron (gestrichelt), Loch (gepunktet), Summe (durchgezogen); ohne Dämpfung (links), gedämpft (rechts)

gleichen Amplituden, während im rechten die Ausdämpfung der Oszillationen bei von Null verschiedenem Endströmen sichtbar ist.

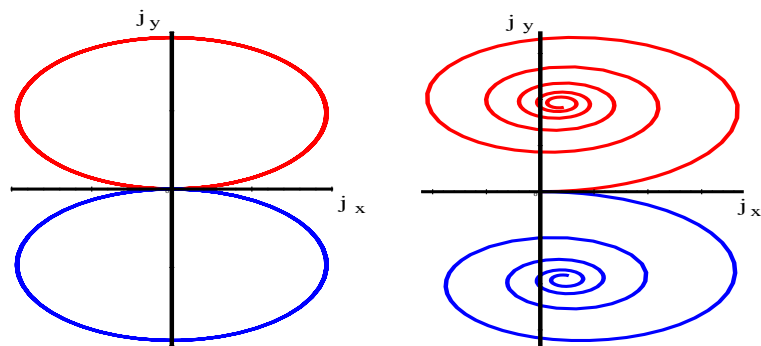


Abbildung 3.3: Parametrische Evolution des Stromes; Elektron (oben), Loch (unten); ohne Dämpfung (links), gedämpft (rechts)

3.2 Die Darstellung des verschobenen Oszillators

Auch im quantenmechanischen Fall behalten wir die Geometrie bei und wählen in dieser die asymmetrische Landau-Eichung $\vec{A} = x\mathcal{B}\vec{e}_y$, wobei es sich bei \vec{e}_y um den Einheitsvektor in y -Richtung handelt. Die symmetrische Eichung, die im magnetischen Fall die Landau-Niveaus mit Hilfe des Drehimpulsoperators konstruiert [Hau94, McD] ist hier weniger günstig, da — wie im klassischen Modell gesehen — die Zylindersymmetrie nicht mehr gegeben ist. Der Hamilton-Operator ist dann

$$H^i = \frac{1}{2m_i} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^i \vec{e}_y x \mathcal{B}}{c} \right)^2 - e^i \mathcal{E} x \quad . \quad (3.14)$$

Da hierbei der Term der potenziellen Energie nur von der x -Koordinate abhängt, drängt sich sogleich ein Produktansatz unter Zuhilfenahme von ebenen Wellen in y - und z -Richtung auf:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{e^{i(k_z z + k_y y)}}{\sqrt{L_z L_y}} \phi(x) \quad . \quad (3.15)$$

Für $\phi(x)$ verbleibt man daraufhin mit einem in x bilinearen Hamilton-Operator, der sich auf die Form

$$H^i = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_i} - \frac{\hbar^2 d^2}{2m_i dx^2} + \frac{1}{2} m_i \omega_c^i (x - X^i)^2 - e^i \mathcal{E} X^i + \frac{(e\mathcal{E})^2}{2m_i \omega_c^i} \quad (3.16)$$

eines verschobenen Oszillators bringen lässt. Die räumliche Verschiebung des Oszillatorsprungs ist dabei durch

$$X^i = \sigma^i \ell^2 k_y + \frac{e^i \mathcal{E} \ell^2}{\hbar \omega_c^i} \quad (3.17)$$

gegeben, wobei die für das Modell charakteristischen Größen der Zyklotronfrequenz ω_c^i (wie im klassischen Modell) und der magnetischen Länge

$$\omega_c^i = \frac{|e|\mathcal{B}}{cm_i} \quad , \quad \ell = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|\mathcal{B}}} \quad (3.18)$$

eingeführt wurden. Hat man nunmehr den Hamilton-Operator auf ein bekanntes Modell zurückgespielt, so lassen sich die Eigenfunktionen sofort aus den Standardlehrbüchern entnehmen:

$$\psi^i(\vec{r}) = \frac{e^{i(k_z z + k_y y)}}{\sqrt{L_z L_y}} \phi_n(x - X^i) \quad , \quad (3.19)$$

mit den Oszillatorlösungen

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\ell 2^n n!}} e^{-x^2/2\ell^2} H_n(x/\ell) \quad (3.20)$$

und der Definition der Hermiteschen Polynome

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} . \quad (3.21)$$

Das Spektrum setzt sich zusammen aus der kinetischen Energie eines freien Teilchens

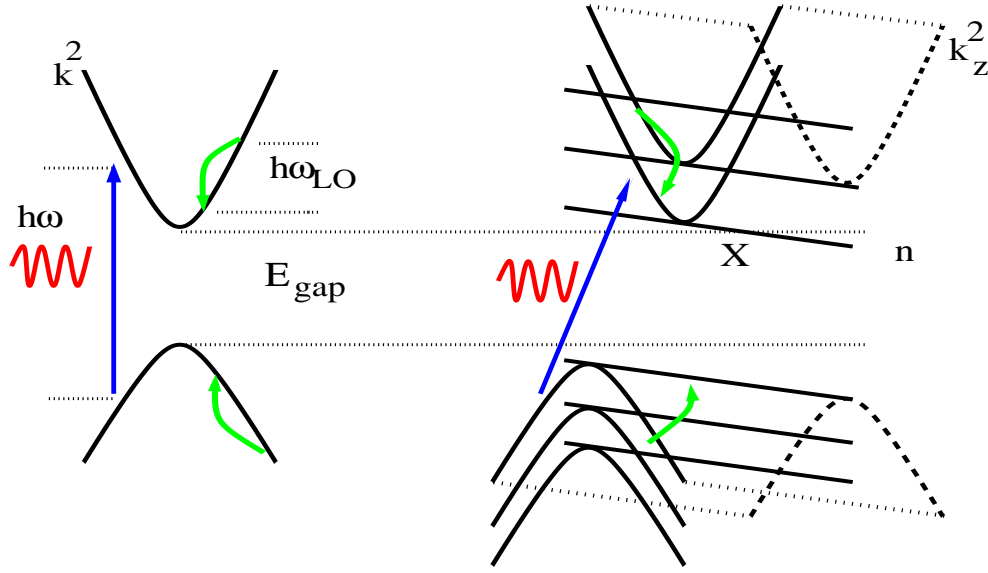


Abbildung 3.4: Spektrum in gekreuzten magnetischen und elektrischen Feldern (rechts) im Vergleich zu dem freien Teilchen (links)

in z -Richtung, den Landau-Energien des magnetischen Falles sowie zwei Korrekturen aufgrund des elektrischen Feldes und lautet

$$\epsilon_{n,X,k_z}^i = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_i} + \hbar\omega_c^i \left(n + \frac{1}{2}\right) - e^i X^i \mathcal{E} + \frac{(|e|\mathcal{E})^2}{2m_i\omega_c^{i2}} . \quad (3.22)$$

Besondere Beachtung verdient hier der Effekt des elektrischen Feldes: Zum einen wird die Entartung im Hinblick auf die räumliche Verschiebungsquantenzahl X aufgehoben, zum anderen sind nun die Wellenfunktion im Gegensatz zum magnetischen Fall massenabhängig. Abbildung 3.4 zeigt welche Veränderungen das Zweibandspektrum des Halbleiters in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern erfährt.

3.3 Die Kopplung an das Lichtfeld

Nachdem der Einteilchen-Hamilton-Operator in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern diagonalisiert wurde, wird nun in dieser Basis die Kopplung mit dem Lichtfeld behandelt. Der entsprechende Hamilton-Operator lautet $H_L = -E(t)P(t)$, wobei die Interband-Polarization $P(t)$ nun in der zweiten Quantisierung formuliert wird. Weil die optische Wellenlänge typischerweise ein Vielfaches der magnetische Länge ℓ beträgt, ist es nötig eine räumlich gemittelte Interband-Polarisation zu betrachten. Beschreibt man mit d_{DM} das Matricelement zwischen den Bloch-Zuständen von Valenz- und Leitungsband nahe der Bandkante, so hat diese gemittelte Polarisation in der Näherung der langsam variierenden Einhüllenden die Form

$$P(t) = \frac{d_{DM}}{V} \int d^3r \hat{\Psi}_h(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_e(\vec{r}, t) + h.c. \quad (3.23)$$

Da der Photonimpuls in dieser Form der Kopplung vernachlässigt wurde, bleiben beim optischen Übergang die Impulskomponenten erhalten. Bezeichnen also \vec{k}, \vec{k}' die Wellenvektoren von Elektron bzw. Loch, so bedeutet das $k_z = -k'_z, k_y = -k'_y$. Das entspricht im linken Teil von Abbildung 3.4 dem senkrechten Pfeil zwischen Valenz- und Leitungsband. Die Impulserhaltung ist nun in die durch die Quantenzahlen n, X, k_z charakterisierte Basis zu überführen. Da die Anregung diagonal in k_y ist, unterscheiden sich aufgrund des elektrischen Feldes die Quantenzahlen X_i für Elektronen und Löcher

$$X_e = -\ell^2 k_y - \frac{|e|\mathcal{E}\ell^2}{\hbar\omega_c^e}, \quad X_h = -\ell^2 k_y + \frac{|e|\mathcal{E}\ell^2}{\hbar\omega_c^h}. \quad (3.24)$$

Daher sind die Feldoperatoren für das Elektron bzw. das Loch ($\hat{\Psi}_i(\vec{r}, t)$) im Überlappintegral unterschiedlich verschoben. Bezeichnet man den Vernichtungsoperator eines Teilchens i im Zustand n, X, k_z mit a_{n,X,k_z}^i und entwickelt die Feldoperatoren nach den Eigenfunktionen (3.19), so erhält man

$$P(t) = \frac{d_{DM}}{V} \sum_{n,n',X,k_z} C(\xi)_{nn'} a_{n',X+\xi,-k_z}^h(t) a_{nXk_z}^e(t) + h.c. \quad (3.25)$$

mit

$$C(\xi)_{nn'} = \int dx \phi_n(x) \phi_{n'}(x - \xi) \quad (3.26)$$

sowie

$$\xi = \frac{|e|\mathcal{E}\ell^2}{\hbar\omega_c} \quad \text{und} \quad \frac{1}{\omega_c} = \frac{1}{\omega_c^e} + \frac{1}{\omega_c^h} = \frac{m_e + m_h}{eB}. \quad (3.27)$$

Wiederum ergeben sich aufgrund des elektrischen Feldes zwei Auswirkungen: (i) Gleichung (3.25) zeigt, dass die Erzeugung und Vernichtung eines Elektron-Loch-Paares

nichtlokal in der Landau-Basis vonstatten geht (beispielsweise wird ein Loch bei $X + \xi$ erzeugt, wohingegen das dazugehörige Elektron bei X erzeugt wird). Im elektrischen Fall ist dieser Effekt unter dem Namen „instantane Polarisierung“ in der Literatur bekannt [Yab, Chu, Pla, Kuz93]. (ii) Im Gegensatz zum magnetischen Fall bewähren sich die dort bekannten Auswahlregeln nicht [Bass]: Es kann sehr wohl vorkommen, dass das optische Matrixelement nichtdiagonal in der Landau-Quantenzahl ist ($n \neq n'$). Im Überlappintegral wird deutlich, dass die Orthogonalität der verschobenen Oszillatorfunktionen nicht mehr gewährleistet ist, da die Verschiebung für Elektronen und Löcher unterschiedlich stark ausfällt, da sie unterschiedliche Massen und Ladungen besitzen. Dieser Punkt ist für die weitere Analyse ganz entscheidend: Nur durch den symmetriebrechenden Einfluss des elektrischen Feldes wird es möglich, durch Laserpulse, die aufgrund ihrer Kürze eine gewisse energetische Breite aufweisen, Wellenpakete anzuregen. Ohne das elektrische Feld wären diese Wellenpakete aufgrund der Auswahlregeln nicht möglich. Diesen beiden Tatsachen trägt im rechten Teil der Figur 3.4 der Anregungspfeil Rechnung (Nichtlokalität, Vermittlung zwischen unterschiedlichen Landau-Niveaus). Besonders anschaulich zeigt sich das Aufbrechen der Auswahlregeln in der optischen Absorption.

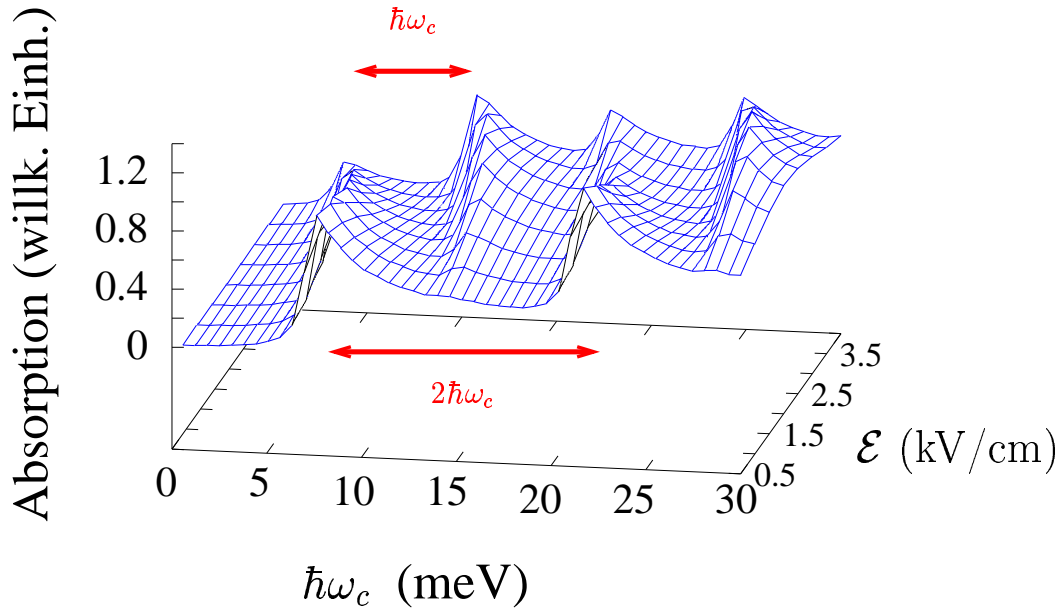


Abbildung 3.5: Spektrum der optischen Absorption aufgetragen gegen die Energie über der unrenormierten Bandkante und gegen das elektrische Feld für $\mathcal{B} = 4$ T

Da hier gegenüber dem Vergleich mit experimentellen Daten die Anschauung im Vor-

dergrund steht (siehe Kommentar in 2.2) sind der Übersichtlichkeit halber in Abbildung 3.5 gleiche Massen für Elektron und Loch angenommen. Dann ergibt sich nämlich für den Abstand der Absorptionsspitzen für den Fall sehr schwacher elektrischer Felder ein Abstand von $2\hbar\omega_c$. Die Nichtdiagonalelemente mögen zwar nicht mehr identisch null sein, aber noch sehr klein im Vergleich zu den Diagonalelementen, so dass die Auswahlregeln im Wesentlichen noch intakt sind. Beide Teilchen müssen die gleiche Landau-Quantenzahl haben, erhöht sich für das Elektron die diskrete Landau-Quantenzahl um eins, so muss dies auch für das Loch gelten, d.h. die Energiedifferenz beträgt also insgesamt *zweimal* die charakteristische Landau-Energie $\hbar\omega_c$. Brechen mit zunehmendem elektrischen Feld die Auswahlregeln auf, so bedeutet dies eine Entkopplung der Landau-Quantenzahlen von Elektron und Loch, sie können sich unterscheiden, was zur Folge hat, dass die Absorptionsspitzen nunmehr in einem Abstand von nur *einer* Landau-Energie $\hbar\omega_c$ zu beobachten sind.

3.4 Streuung durch longitudinale, optische Phononen

Die Streurrate pro Zeiteinheit ist allgemein durch Fermis goldene Regel gegeben:

$$W_{f,i} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H^{int} | i \rangle|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i) \quad (3.28)$$

Dabei sind durch i der Anfangs- und durch f der Endzustand ($i \equiv \text{initial}$, $f \equiv \text{final}$) markiert. $\langle f | H^{int} | i \rangle$ beschreibt das Wechselwirkungsmatrixelement zwischen Anfangs- und Endzustand, und $\delta(\epsilon_f - \epsilon_i)$ ist die energieerhaltende Deltafunktion.

Bei niedrigen Dichten, wenn die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigbar ist, stellt die Wechselwirkung mit den LO-Phononen den dominanten Streumechanismus dar. Üblicherweise wird diese Wechselwirkung durch die Fröhlich-Kopplung in der Basis ebener Wellen formuliert. Der entsprechende Wechselwirkungs-Hamilton-Operator wurde bereits in Abschnitt 2.2 in den Gleichungen 2.11 bis 2.13 angegeben. Wiederum stellt einen die Voigt-Geometrie vor die Aufgabe der Anpassung. Fourier-transformiert man die Eigenfunktionen des verschobenen Oszillators

$$\phi_n(x - X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk_x e^{ik_x(x-X)} \tilde{\phi}_n(k_x) = \frac{\sqrt{2\pi}}{L_x} \sum_{k_x} e^{ik_x(x-X)} \tilde{\phi}_n(k_x) \quad , \quad (3.29)$$

so ist sofort die Entwicklung nach ebenen Wellen vollzogen:

$$|n, X, k_z\rangle = \sqrt{\frac{2\pi}{L_x}} \sum_{k_x} e^{-ik_x X} \tilde{\phi}_n(k_x) |\vec{k}\rangle \quad . \quad (3.30)$$

Das Matrixelement für die LO-Phononemission ist dann (mit \vec{q} ist der Zustand des emittierten Phonons beschrieben)

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \langle n', X', k'_z; \vec{q} | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | \vec{q} \rangle \langle \vec{k} | H_{e/h-ph}^e | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | n, X, k_z \rangle \\ &= \langle n', X', k'_z; \vec{q} | \vec{k}' \rangle \quad g_{\vec{q}} \sqrt{1 + N_{\vec{q}}} \quad \langle \vec{k} | n, X, k_z \rangle \\ &= 2\pi g_{\vec{q}} \frac{\sqrt{1 + N_{\vec{q}}}}{L_x} \delta_{q_y, k_y - k'_y} \delta_{q_z, k_z - k'_z} \sum_{k_x} e^{ik_x X} \sum_{k'_x} e^{-ik'_x X'} \delta_{q_x, k_x - k'_x} \tilde{\phi}_n(k_x)^* \tilde{\phi}_{n'}(k'_x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{C^i(1 + N_{\vec{q}})} \frac{1}{q} \delta_{q_y, k_y - k'_y} \delta_{q_z, k_z - k'_z} e^{-iq_x X'} \\ &\quad \times \int dk_x e^{ik_x(X-X')} \tilde{\phi}_n(k_x)^* \tilde{\phi}_{n'}(k_x - q_x) \end{aligned} \quad (3.31)$$

mit $C^i = \alpha_i \frac{4\pi\hbar(\hbar\omega_{LO})^{3/2}}{(2m_i)^{1/2}}$. Hierbei bezeichnet $\alpha_i = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{m_i}{2\hbar\omega_0}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)$ die dimensionslose Fröhlich-Konstante der Polaronkopplung. $N_{\vec{q}}$ ist die Phononverteilung, da die Phononen als dispersionslos und thermisch angenommen werden, gilt $N_{\vec{q}} = N(\hbar\omega_{LO}) = 1/(e^{\beta\hbar\omega_{LO}} - 1)$. D.h. für die Phononen wird keine Dynamik geschrieben, sie sind im thermischen Gleichgewicht und fungieren als Bad. Benutzt man noch die Transformation

$$\int dk_x e^{-ik_x X} \tilde{\phi}_n(k_x)^* \tilde{\phi}_{n'}(k_x - q_x) = \int dx e^{iq_x x} \phi_n(x) \phi_{n'}(x - X) \quad , \quad (3.32)$$

so führt Fermis goldene Regel auf folgende Übergangsraten:

$$\begin{aligned} W_{n,X,k_z;n',X',k'_z}^{\vec{q},i} &= \frac{2\pi C^i}{\hbar L_x L_y L_z} \left(1 + N(\hbar\omega_{LO})\right) \delta(\epsilon_{nXk_z}^i - \epsilon_{n'X'k'_z}^i - \hbar\omega_{LO}) \\ &\times \delta_{q_y, k_y - k'_y} \delta_{q_z, k_z - k'_z} \frac{|\int dx e^{iq_x x} \phi_n(x) \phi_{n'}(x - (X - X'))|^2}{q_x^2 + \frac{1}{\ell^4}(X - X')^2 + (k_z - k'_z)^2} \quad . \quad (3.33) \end{aligned}$$

Die „detaillierte Bilanz“ gibt dann aus der angegebenen Rate für die Phononemission sofort die für die Absorption. Mit Hilfe dieser Übergangsraten können nun die vollständigen Stoßterme im Rahmen einer boltzmannschen Streuung aufgestellt werden. Wie diese unter den nachfolgenden Näherungen aussehen, ist im Anhang A dokumentiert. Anstatt jedoch die vollständige Kinetik der Elemente der Dichtematrix zu behandeln, beschränken wir uns auf die Beschreibung der Dämpfung der Nichtdiagonalelemente durch Relaxationszeiten. Zu diesem Zweck berechnet man die Wahrscheinlichkeit (pro Zeit), von einem gegebenen Zustand in alle anderen Zustände zu streuen, ohne sich darum zu kümmern, ob dieser Zustand möglicherweise schon besetzt ist. Summiert man dann über alle Streukanäle, so ist das Ergebnis eine quantenzahlabhängige inverse transversale Lebenszeit

$$\frac{1}{\tau_{nXk_z}^i} = \frac{1}{\tau_{nk_z}^i} = \sum_{n'X'k'_z} \sum_{\vec{q}} W_{n,X,k_z;n',X',k'_z}^{\vec{q},i} \quad . \quad (3.34)$$

Das bedeutet nichts anderes, als dass alle Streuprozesse mit exponentiellen Dämpfungen simuliert werden, deren charakteristische Zeiten für jede Quantenzahl-Kombination individuell berechnet werden. Günstig wirkt es sich dabei für die numerische Evaluation aus, dass die inverse Lebenszeit eine Funktion nur von k_z und der diskreten Landau-Quantenzahl n ist, hingegen unabhängig von der Quantenzahl der räumlichen Verschiebung X als Ausdruck der relativen Translationsinvarianz.

Abbildung 3.6 zeigt Berechnungen der soeben definierten inversen Lebenszeit für Elektronen für die niedrigsten Landau-Quantenzahlen. Dass die Kurven dabei als Funktionen der kinetischen Energie der Bewegung in z -Richtung ($E_{kin} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e}$) dargestellt

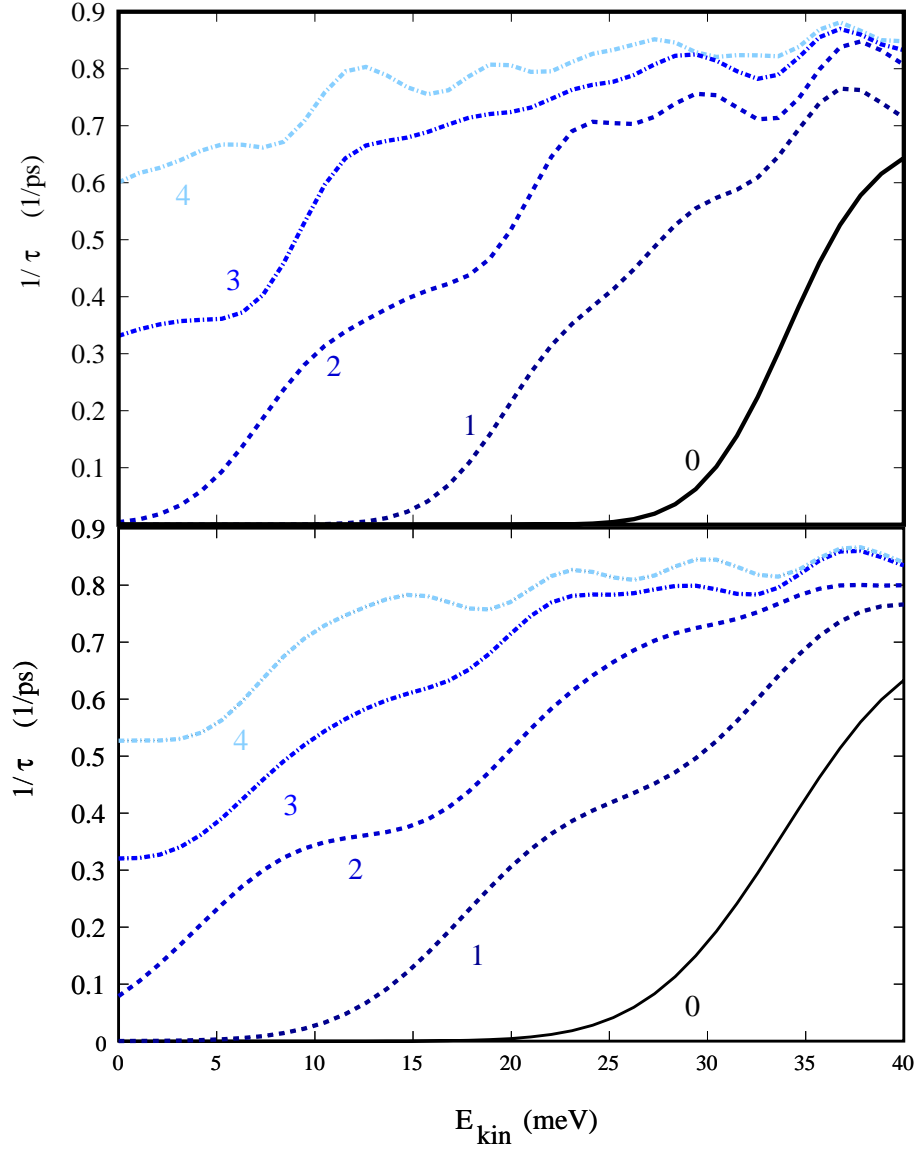


Abbildung 3.6: Inverse transversale Relaxationszeit τ_{n,k_z}^e für die Elektron in verschiedenen Landau-Niveaus gegen $E_{kin} = \hbar^2 k_z^2 / 2m_e$; $\mathcal{B} = 6$ T; $\mathcal{E} = 4$ kV/cm (oben); $\mathcal{E} = 6$ kV/cm (unten)

sind, ermöglicht den direkten Vergleich mit der charakteristischen LO-Phononenergie. Als magnetische Feldstärke wurde $\mathcal{B} = 6$ T gewählt, was einer Zyklotronenergie für das Elektron von $\hbar\omega_c^e = 10.5$ meV entspricht. Für das niedrigste Landau-Subband sieht man in beiden Bildern deutlich die Phononschwelle (36 meV). Der Grad, inwie-

weit die Schwelle aufgeweicht wird, hängt dabei von der Stärke des elektrischen Feldes ab. Da das Spektrum aufgrund des Terms $-e^i \mathcal{E} X^i$ nach unten nicht beschränkt ist, ist Intrasubband-Streuung zumindest im Prinzip auch bei sehr kleinen kinetischen Energien $E_{kin} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e}$ möglich. „Zumindest im Prinzip“ deshalb, da durch die Lokalisierung der Wellenfunktion im magnetischen Feld Streuungen über eine Distanz von mehr als einigen magnetischen Längen extrem unwahrscheinlich werden. Die Details hängen hier natürlich vom elektrischen Feld und den konkreten Quantenzahlen der Wellenfunktion ab. Weil aber somit die Entfernung, über die ein Streuprozess noch mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit stattfindet, begrenzt ist, gilt dieses auch für die Energiedifferenz des durch das elektrische Feld verursachten nichtlokalen Prozesses. Für die hier untersuchten Parameter ($4 \text{ T} < \mathcal{B} < 8 \text{ T}$, $4 \text{ kV/cm} < \mathcal{E} < 6 \text{ kV/cm}$) ist diese Energie weit davon entfernt, allein die für den Streuprozess nötigen 36 meV bereitzustellen zu können. Der Hauptanteil muss also aus der kinetischen Energie abgeschöpft werden können: Es existiert eine Phononschwelle. Betrachtet man nicht das niedrigste Landau-Subband, sondern höhere Landau-Subbänder, so wird das Bild um den Aspekt der Landau-Energien reicher. Zusätzlich zu dem bereits gesagten, ist nun ein Energiebeitrag möglich, dadurch dass in niedrigere Landau-Subbänder gestreut werden kann: Das Stichwort ist hier „Intersubband-Streuung“. Exemplarisch dafür ist die Kurve $n = 1$ bei $E = 6 \text{ kV/cm}$: Für die erste Schwelle ist die Intersubband-Streuung nach Zuständen mit $n = 0$ verantwortlich, der dann für höhere kinetische Energien die Schwelle für die Intrasubband-Streuung folgt.

Von den berechneten Werten der Relaxationszeiten hat man also für eine Anregung unterhalb der Phononschwelle eine nahezu ungedämpfte Bewegung zu erwarten, wohingegen oberhalb der Schwelle eine effektive Dämpfung auf einer Pikosekunden-Zeitskala einsetzt. Dieser zweite Befund steht in Übereinstimmung mit der experimentellen Beobachtung einiger aufgelöster Zyklotronoszillationen auf einer Pikosekunden-Zeitskala [Som96, Som94, Bau].

Richtet man bei den inversen Lebenszeiten den Fokus auf eine einzige — geeignete — Quantenzahlkombination, und variiert die Felder, so lässt sich das Szenario sehr intuitiv vom magnetischen Grenzfall erfassen. Als „geeignet“ betrachten wir hier exemplarisch die Kombination $n = 4$ und $k_z = 0$, so dass Intersubband-Streuung in niedrige Landau-Subbänder möglich ist, während der Freiheitsgrad der kinetischen Energie eingefroren bleibt. Der magnetische Grenzfall zeichnet sich dadurch aus, dass es nur dann zu erwähnenswerter Streuung kommt, wenn die Energiebilanz der LO-Phononenergie auf der einen und ein ganzes Vielfaches der Zyklotronenergie ($\omega_c = e\mathcal{B}/cm$) auf der anderen Seite gewährleistet ist: $\hbar\omega_c(n - n') = \hbar\omega_{LO}$. Eine Forderung, die nichts anderes als die Energieerhaltung beim Stoß ausdrückt. Das führt zu den „Magneto-Phonon-

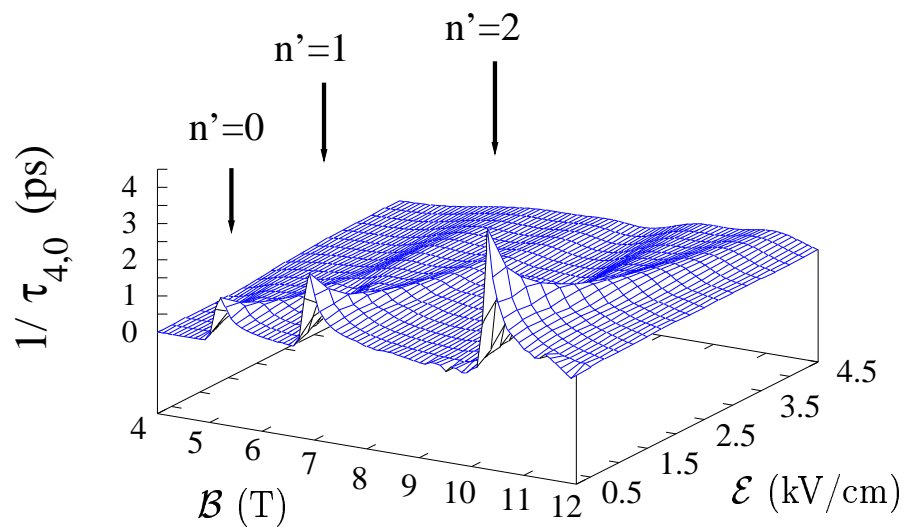


Abbildung 3.7: Inverse transversale Relaxationszeit $\tau_{4,0}^e$ für Elektronen aufgetragen gegen magnetisches und elektrisches Feld

Resonanzen“ [War, Barn, Vau, Mur, xWu, Hai], die in Abbildung 3.7 als scharfe Spitzen in der inversen Lebensdauer auffallen. Ein größer werdendes elektrisches Feld führt zu einem zusätzlichen Freiheitsgrad, der Energieerhaltung zu genügen, so dass die Resonanzen immer stärker ausschmieren.

3.5 Die lokale Zustandsdichte

Um ein besseres Verständnis für die Streuung zu entwickeln und das Modell von seinen beiden Grenzfällen besser zu durchschauen, betrachten wir die lokale Zustandsdichte. Beschreibt ν die Gesamtheit aller Quantenzahlen, so ist die lokale Zustandsdichte definiert als

$$n(\epsilon, \vec{x}) = \sum_{\nu} \delta(\epsilon - \epsilon_{\nu}) |\psi_{\nu}(\vec{x})|^2, \quad (3.35)$$

d.h. im Gegensatz zur Zustandsdichte

$$n(\epsilon) = \sum_{\nu} \delta(\epsilon - \epsilon_{\nu}) \quad (3.36)$$

geht in die lokale Version noch das Absolutquadrat der Wellenfunktion mit ein. Diese Größe ist deshalb von Interesse, weil in dem Problem der Phononstreuung in gekreuzten Feldern der Übergang nicht nur energetisch erlaubt sein muss, wofür die Zustandsdichte ein Maß gäbe, sondern sie muss aufgrund der lokalisierten Wellenfunktionen auch lokal möglich sein. Zwischen beiden gilt die Beziehung

$$n(\epsilon) = \frac{1}{V} \int d\vec{x} n(\epsilon, \vec{x}) \quad (3.37)$$

aus der sofort hervorgeht, dass beide Zustandsdichten zusammenfallen, sofern das Spektrum nicht vom Ort abhängt, wenn also das Lokalitätsprinzip nicht zur Anwendung kommt. Dies gilt für den magnetischen Fall, in dem die Energie ortsunabhängig ist, und die beiden Zustandsdichten zusammenfallen:

$$n_{\mathcal{B}}(\epsilon, \vec{x}) = n_{\mathcal{B}}(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^2 \ell^3} \sqrt{\frac{2}{\hbar\omega_c}} \sum_n \frac{\theta(\epsilon - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}))}{\sqrt{\epsilon - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})}}. \quad (3.38)$$

Sobald jedoch das elektrische Feld ins Spiel kommt, wird die Energie ortsabhängig. Die lokale Zustandsdichte lautet für den Fall gekreuzter elektrischer und magnetischer Felder ($\mathcal{E} \perp \mathcal{B}$):

$$n_{\mathcal{E} \perp \mathcal{B}}(\epsilon, \vec{x}) = n_{\mathcal{E} \perp \mathcal{B}}(\epsilon, x) \frac{2}{(2\pi)^2 \ell^3} \frac{1}{|e|\mathcal{E}} \sum_n \int_0^\infty dk_z |\phi_n(x - X_0)|^2, \quad (3.39)$$

wobei X_0 die Verschiebung in Argument der Wellenfunktion beschreibt:

$$X_0 = \frac{1}{|e|\mathcal{E}} \left(\epsilon - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) - \frac{\hbar\omega_c}{2} k_z^2 - \frac{(e\mathcal{E}\ell)^2}{2\hbar\omega_c} \right) \quad (3.40)$$

Für den elektrischen Fall findet man (z.B. mit [Hau94]):

$$n_{\mathcal{E}}(\epsilon, \vec{x}) = n_{\mathcal{E}}(\epsilon, x) = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar} \right)^{4/3} (|e|\mathcal{E})^{1/3} \left(\tilde{\epsilon} Ai^2(-\tilde{\epsilon}) + [Ai'(-\tilde{\epsilon})]^2 \right) \quad (3.41)$$

mit

$$\tilde{\epsilon} = - \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{|e|\mathcal{E}x - \epsilon}{(|e|\mathcal{E})^{2/3}} \quad (3.42)$$

und der Definition der Airy-Funktionen

$$Ai(x) = \int_0^\infty du \cos\left(ux - \frac{u^3}{3}\right) \quad (3.43)$$

Für den magnetischen Fall gibt es wie bereits erwähnt keine Abhängigkeit von Koordinate, aber auch für die Fälle, in die das elektrische Feld involviert ist, stellt die Abhängigkeit von ϵ und x tatsächlich nur eine Abhängigkeit von der Differenz $n(\epsilon, x) = n(\epsilon - |e|\mathcal{E}x)$ dar, so dass wir bei der folgenden Auswertung ohne Beschränkung der Allgemeinheit $x = 0$ wählen können.

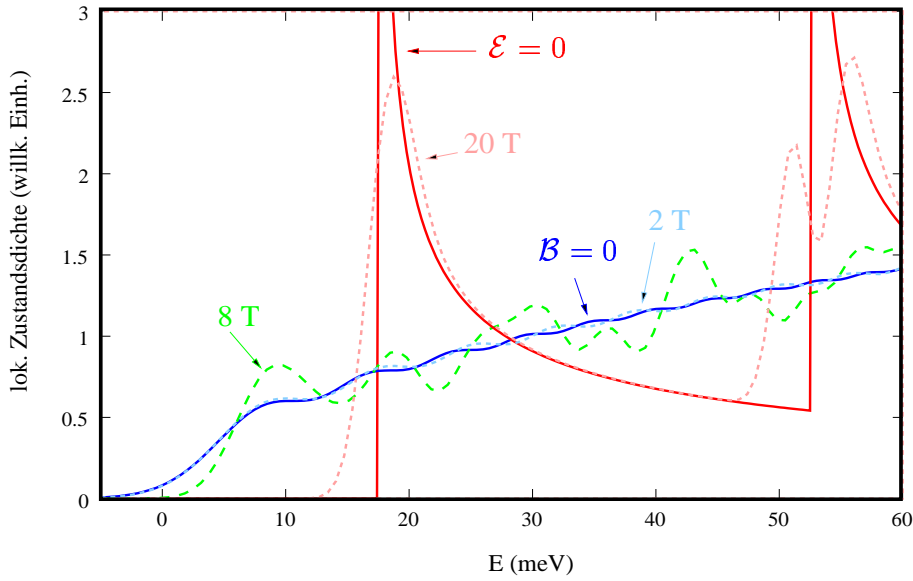


Abbildung 3.8: Lokale Zustandsdichte für verschiedene magnetische Feldstärken ($\mathcal{B} = 2, 8, 20$ T), $\mathcal{E} = 4$ kV/cm; sowie für die beiden Grenzfälle ohne elektrisches bzw. magnetisches Feld

In der graphischen Zusammenstellung wird plastisch, wie das System gekreuzter magnetischer und elektrischer Felder sich seinen Grenzfällen annähert. Bei festem elektrischem Feld $\mathcal{E} = 4$ kV/cm ist die Kurve für $\mathcal{B} = 2$ T fast identisch mit der des

elektrischen Falles, während die Kurve für $\mathcal{B} = 20$ T deutlich die charakteristischen Spitzen des rein magnetischen Falles ausbildet. Im Zwischenbereich (hier durch $\mathcal{B} = 8$ T vertreten) weist jedoch eine ganz eigene Charakteristik auf. Das legt den Schluss nahe, dass es für diesen Parameterbereich nicht gelegen erscheint, Näherungen des einen oder anderen Grenzfalles zu versuchen.

Die Ähnlichkeiten des Hochfeldfalles mit den Magneto-Phonon-Resonanzen in den Streuzeiten ist natürlich alles andere als zufällig: Wenn im vorherigen Abschnitt qualitativ mit der Energieerhaltung argumentiert wurde, so ist der gleiche Sachverhalt hier quantitativ erfasst. Abschließend für die Grenzbetrachtung ist hier noch zu erwähnen, dass die lokale Zustandsdichte für den elektrischen Fall direkten Eingang in die Beschreibung des Franz-Keldysh-Effektes [Fra, Kel] findet.

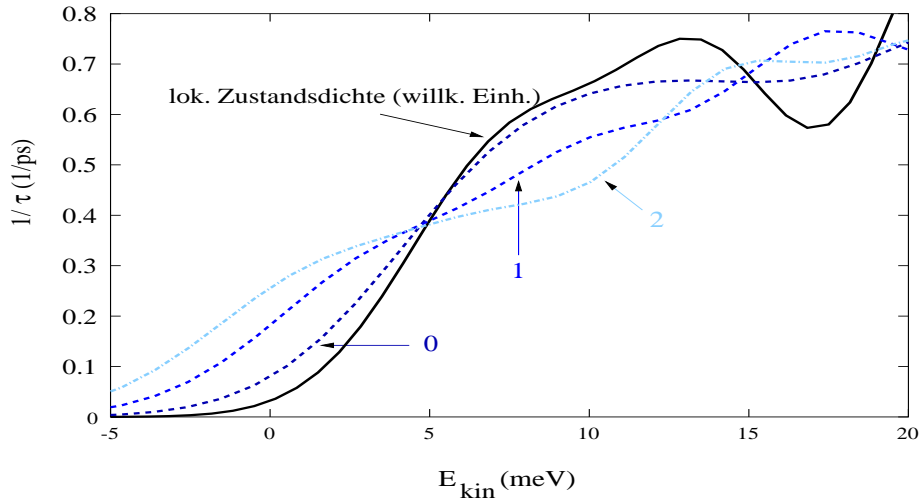


Abbildung 3.9: Schwellenverhalten: Lokale Zustandsdichte und inverse Lebensdauern (verschoben um ihre Landau-Niveau-Energien); $\mathcal{E} = 4$ kV/cm, $\mathcal{B} = 6$ T

Vergleicht man nun in Abbildung 3.9 die lokale Zustandsdichte mit den inversen Lebensdauern der untersten Landau-Niveaus (um deren Energie verschoben), so sieht man, dass hier das Schwellenverhalten, das ja seine Begründung in der Kombination von Energieerhaltungs- und Lokalisationsargumenten fand, nachvollzogen wird. Für höhere Landau-Niveaus macht sich dann aber der spezifische Charakter der Streuung immer stärker bemerkbar, so dass man um die detaillierte Rechnung, wie sie im vorherigen Abschnitt dargelegt und betrieben wurde, nicht umhin kommt.

3.6 Ableitung der Kinetik auf einer reduzierten Untermenge der Dichtematrix

Nun wird für einen Moment die Streukinetik zurückgestellt und das Elektron-Loch-System sowie seine Kopplung ans kohärente Lichtfeld betrachtet. Fasst man die drei Quantenzahlen n, X, k_z in dem Multiindex ν zusammen, so lautet der Hamilton-Operator:

$$H = \sum_{\nu} (\epsilon_{\nu}^e a_{\nu}^{e\dagger} a_{\nu}^e + \epsilon_{\nu}^h a_{\nu}^{h\dagger} a_{\nu}^h) - \frac{1}{2} \left[d_{DM} E_0(t) e^{i\omega t} \sum_{\nu\nu'} D_{\nu\nu'} a_{\nu'}^h a_{\nu}^e + h.c. \right] . \quad (3.44)$$

Für die Elektron- und Loch-Subband-Dichtematrixelemente $f_{\nu\nu'}^i \equiv \langle a_{\nu'}^{i\dagger} a_{\nu}^i \rangle$ sollte man sich klar machen, dass hierbei durch jeweilige Indexkombinationen Populationen ($\nu = \nu'$) und Intersubband-Polarisationen ($\nu \neq \nu'$) enthalten sind. Schließt man für die Interband-Polarisationen die schnell oszillierende Phase in die Definition mit ein $P_{\nu\nu'} \equiv e^{-i\omega t} \langle a_{\nu'}^h a_{\nu}^e \rangle$, so erhält man in der „Drehende-Welle-Näherung“ (rotating wave approximation) mit dem Ausdruck für die Rabi-Frequenz $\hbar\Omega_R(t) = d_{DM} E_0(t)$ die Bewegungsgleichungen

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{\nu}^e - \epsilon_{\nu'}^e) \right) f_{\nu\nu'}^e = -\frac{i}{2} \sum_{\mu\mu'} D_{\mu\mu'} (\Omega_R \delta_{\mu\nu} P_{\mu'\nu'} - \Omega_R \delta_{\mu\nu'} P_{\mu'\nu}^*) \quad , \quad (3.45)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{\nu'}^h - \epsilon_{\nu}^h) \right) f_{\nu\nu'}^h = -\frac{i}{2} \sum_{\mu\mu'} D_{\mu\mu'} (\Omega_R \delta_{\mu'\nu} P_{\nu'\mu} - \Omega_R \delta_{\nu'\mu'} P_{\nu\mu}^*) \quad , \quad (3.46)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{\nu'}^e + \epsilon_{\nu}^h - \hbar\omega) \right) P_{\nu\nu'} = \frac{i}{2} \Omega_R \sum_{\mu\mu'} D_{\mu\mu'} (\delta_{\nu'\mu} \delta_{\nu\mu'} - \delta_{\mu'\nu} f_{\mu\nu}^e - \delta_{\nu'\mu} f_{\mu'\nu}^h) . \quad (3.47)$$

An dieser Stelle wird wiederum in zweierlei Weise der symmetriebrechende Effekt des elektrischen Feldes deutlich: Während die Gleichungen für die Intraband-Matrixelemente ohne Felder für Elektronen und Löcher identisch sind, unterscheiden sie sich hier in ihrer Kopplung an die Interband-Polarisation durch das optische Feld. Viel wichtiger ist noch die Tatsache, dass die Intersubband-Polarisationskomponenten $f_{\nu\nu'}^i$ ($\nu \neq \nu'$) überhaupt angeregt werden. Im magnetischen Fall geschieht dies nicht (für die Kinetik in diesem Fall siehe z.B. [mWu98/1, mWu98/2]). Wie wir im nächsten Abschnitt zeigen werden, ist diese Intersubband-Polarisation eng verknüpft mit dem THz-Signal, so dass sich hier die Einsicht Bahn bricht, dass das elektrische Feld in der Voigt-Geometrie die THz-Emission erst ermöglicht.

Dadurch dass hier also Komponenten der Intersubband-Polarisation zu berücksichtigen sind, wächst die Anzahl der zu behandelnden Dichtematrixelemente enorm, so

dass nun daran gegangen werden muss, den numerischen Aufwand zu bändigen. Dazu dient ein Näherungsschema auf der Basis der Eigenschaften der optischen Matrixelemente. Es wurde bereits gezeigt, dass gilt $D_{\nu,\nu'} = D_{n,n'} \delta_{X',X-\xi} \delta_{k_z,-k'_z}$. Zwar gelten die Auswahlregeln in den Landau-Quantenzahlen nicht länger, nichtsdestoweniger lässt sich die Impulserhaltung $\delta_{k_z,-k'_z}$ ebenso wie die Tatsache ausnutzen, dass die Verschiebung in der Quantenzahl X durch $\delta_{X',X-\xi}$ fixiert ist. Wendet man diese Regel auf die Gleichungen an, so verbleibt man mit einer geschlossenen Untermenge von Gleichungen. Diese Untermenge ist nur solange geschlossen, wie ausschließlich die kohärenten Anteile (3.45) bis (3.47) betrachtet und Streuterme vernachlässigt werden. Zöge man hingegen die Streuterme in Betracht, so öffnete man die Kopplung an Terme, die durch optische Feld nicht angeregt würden. In der Näherung werden also die indirekt angeregten Größen als wenig wichtig erachtet. Im Weiteren beschränken wir uns auf die reduzierte Untermenge von Gleichungen; nur dort fügen wir nachträglich die quantenzahlabhängigen transversalen Relaxationszeiten ein.

Mit den abkürzenden Definitionen

$$f_{nXkn'Xk}^i = f_{nn'Xk}^i \quad , \quad P_{nXkn',X-\xi,-k} = P_{nn',X-\frac{\xi}{2},k} \quad (3.48)$$

lauten diese Gleichungen

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} \nu^e \right) f_{nn',X-\frac{\xi}{2},k}^e = -\frac{i}{2} \sum_m \left(D_{nm} \Omega_R P_{mn',X,-k} - D_{n'm} \Omega_R P_{mn,X,-k}^* \right) + \frac{\partial}{\partial t} \bigg|_{coll} f_{nn'X-\frac{\xi}{2},k}^e \quad (3.49)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} \nu^h \right) f_{nn',X+\frac{\xi}{2},k}^h = -\frac{i}{2} \sum_m \left(D_{mn} \Omega_R P_{n'm,X,k} - D_{mn'} \Omega_R P_{nm,X,k}^* \right) + \frac{\partial}{\partial t} \bigg|_{coll} f_{nn'X+\frac{\xi}{2},k}^h \quad (3.50)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \nu^P \right) P_{nn'Xk} = \frac{i}{2} \Omega_R \left(D_{n'n} - \sum_m \left(D_{mn} f_{mn',X-\frac{\xi}{2},-k}^e + D_{n'm} f_{mn,X+\frac{\xi}{2},k}^h \right) \right) + \frac{\partial}{\partial t} \bigg|_{coll} P_{nn'Xk} \quad (3.51)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bigg|_{coll} f_{nn'X \mp \frac{\xi}{2},k}^i = -\frac{f_{nn'X \mp \frac{\xi}{2},k}^i}{\frac{1}{2}(\tau_{nk_z}^i + \tau_{n'k_z}^i)} \quad \text{für } (n \neq n') \quad , \quad (3.52)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_{coll} P_{nn'Xk} = - \frac{P_{nn'Xk}}{\frac{1}{2}(\tau_{nk_z}^h + \tau_{n'k_z}^e)} \quad . \quad (3.53)$$

Hierbei sind ν^e, ν^h und ν^P durch

$$\nu^i = \hbar\omega_c^i(n - n') \quad , \quad (3.54)$$

$$\nu^P = e_{\nu'}^e + e_{h\nu}^h - \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_h} + \hbar\omega_c^e(n' + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_c^h(n + \frac{1}{2}) - \frac{c^2 E^2}{B^2} \frac{m_e^e + m_c^h}{2} - \Delta \quad (3.55)$$

definiert, wobei $\Delta = \hbar\omega - E_g$ die Verstimmung ist. Relaxationsterme wurden sowohl in den Interband- als auch in den Intraband-Polarisations-Gleichungen eingeführt, jedoch keine Thermalisierungsterme in den Populationsgleichungen ($n = n'$). Wiederum liegt die Ursache im Effekt des elektrischen Feldes: Wie schon erwähnt ist das Spektrum nach unten nicht beschränkt, es sei denn die Beschränkung würde durch Randbedingungen erzwungen. Die Fermi-Funktion ist daher nicht wohldefiniert, es gibt keinen Gleichgewichtszustand, gegen den die Teilchen relaxieren könnten. Deshalb kann der Ansatz einer longitudinalen Relaxationszeit T_1 — auch quantenzahl-abhängig — nicht dazu nützen, die Relaxation zu beschreiben. Das bedeutet jedoch nicht, dass die Teilchen nicht durch Stöße mit den Phononen relaxierten, sie werden sehr wohl zu energetisch niedrigeren Zuständen gestreut, nur stellt sich dabei jedoch kein finaler Zustand ein. Verteilungen, die auf einer Pikosekunden-Zeitskala nicht relaxieren, Gleichungen, die auf einer Pikosekunden-Zeitskala solchen Prozessen überhaupt kein Platz einräumen, beides scheint auf den ersten Blick recht unphysikalisch, fügt sich jedoch problemlos in unser Näherungsschema: Eine detaillierte Behandlung der Gleichungen zeigt, dass die Gleichungen der Populationen und der Intersubband-Polarisationen im Rahmen des Relaxationszeitansatzes nur auf der kurzen Zeitskala des Femtosekunden-Pulses gekoppelt sind, auf der die Relaxation noch nicht sehr effektiv ist: Die Erfahrungen zeigen nämlich, dass die für die Thermalisierung verantwortlichen longitudinalen Relaxationszeiten von der gleichen Größenordnung (bis auf einen Faktor 2) sind wie die transversalen. Unsere Rechnungen bestimmen die transversalen Relaxationszeiten im Pikosekundenbereich, wohingegen ein Puls der Länge 141 fs (volle Breite bei der Hälfte des Maximums der Intensität) verwandt wurde. Somit ist also für solche Pulslängen die Näherung gut gerechtfertigt, denn nach dem Puls sind die Gleichungen der Populationen und Intersubband-Polarisationen entkoppelt und die Dämpfung der Intersubband-Polarisationen ist in den Grenzen des Modells durch die auf diese Größen angewandten inversen Lebenszeiten sehr gut beschrieben. Allgemein wird in der Theorie der Laserpulse durch eine langsam veränderliche Einhüllende $E_0(t)$ und eine hochfrequente Trägerwelle charakterisiert. Man kann jedoch

experimentell Pulse präparieren, bei denen die Frequenz der Trägerwelle innerhalb der Einhüllenden variiert. Man spricht im Englischen von „chirped pulses“. „positive chirp“ bedeutet, die Trägerfrequenz ist am Ende des Pulses größer als zu Beginn, „negative chirp“ beschreibt das Gegenteil.

Von Izumida et al. [Izu] stammen Experimente mit gechirpten Pulsen unter Variation der Pulsdauer. Bei langen Pulsen weist die Beobachtung Unterschiede auf, je nachdem ob es sich um positiven bzw. negativen chirp handelt; diese Unterschiede lassen Besetzungseffekte vermuten. Dass sich für die kurzen Pulse, die wir im Sinn haben, keine Unterschiede zeigen, nehmen wir als Bestätigung, dass unsere Näherung ohne Thermalisierung sehr wohl anwendbar ist.

3.7 Terahertz-Stromoszillationen

Für die zu untersuchende THz-Strahlung schränken wir den Blickwinkel ein auf die Intraband-Beiträge — oder andersherum: Die Beiträge der Interband-Polarisation werden nicht berücksichtigt. Dies geschieht, da diese Beiträge von Frequenzen beherrscht werden, die mit der Bandlücke korreliert sind, und von daher im optischen und nicht im THz-Bereich liegen.

Ausgehend von der folgenden gemittelten Definition des Stromdichte-Operators, die nur die Intraband-Anteile umschließt

$$\vec{J}^i = \frac{1}{V} \int d\vec{r} \frac{e^i}{2m_i} \hat{\Psi}_i^\dagger(\vec{r}, t) \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^i \vec{e}_y x \mathcal{B}}{c} \right] \hat{\Psi}_i(\vec{r}, t) + h.c. \quad , \quad (3.56)$$

erhält man durch Entwicklung der Feldoperatoren in der Basis des verschobenen Oszillators:

$$\langle J_z^i \rangle = \frac{e^i}{m_i V} \sum_{n, X, k_z} \hbar k_z f_{n, n, X, k_z}^i \quad , \quad (3.57)$$

$$\langle J_y^i \rangle = -\frac{e^i \mathcal{E} c N^i}{\mathcal{B} V} - \frac{|e| \hbar \sqrt{2}}{m_i \ell V} \sum_{n, X, k_z} \sqrt{n+1} \operatorname{Re}(f_{n+1, n, X, k_z}^i) \quad , \quad (3.58)$$

$$\langle J_x^i \rangle = \frac{-e^i \hbar \sqrt{2}}{m_i \ell V} \sum_{n, X, k_z} \sqrt{n+1} \operatorname{Im}(f_{n+1, n, X, k_z}^i) \quad . \quad (3.59)$$

Da der Effekt des elektrischen Feldes auf die x - y -Ebene beschränkt ist, überrascht es nicht, dass der Strom in z -Richtung verschwindet (Symmetrie in der Summation, siehe auch Abb. 3.1). Der erste Term in der y -Richtung beschreibt einen Nettostrom proportional zur Population. Er ist masseunabhängig, reagiert jedoch auf das Vorzeichen der Ladung, was dazu führt, dass sich hier Elektron- und Loch-Beitrag gerade aufheben (Ladungsneutralität bei optischer Anregung).

Von konzeptionellem Interesse ist die Tatsache, dass es trotz des elektrischen Feldes in der kohärenten Beschreibung zu keiner makroskopischen Trennung der entgegengesetzt geladenen Elektronen und Löcher kommt. Die Beobachtung entspricht dem klassischen Fall ohne Dämpfung (Abschn. 3.1). War es dort der Dämpfungsterm, der zu einer makroskopischen Separation führte, so wäre im quantenmechanischen Fall eine Trennung der unterschiedlichen Ladungsträger der Asymmetrie in den Streutermen (siehe Anhang A) anzurechnen. Wir messen jedoch dem Effekt der Streuung wiederum nur sekundäre Bedeutung bei und vernachlässigen für die sehr niedrigen realisierten Dichten die resultierende Ladungstrennung. Es wird daher davon abgesehen, das elektrische Feld selbstkonsistent zu berechnen.

Die Gleichungen (3.57) bis (3.59) zeigen, dass — wie bereits erwähnt — alle Stromkomponenten und damit auch das abgestrahlte Signal ihren Ursprung in der Intersubband-Polarisation haben; genauer: in den Komponenten der Intersubband-Polarisationen, die sich in ihren Landau-Quantenzahlen um den Betrag eins unterscheiden. Lässt man die Gleichungen unter dem Gesichtspunkt dieser Größen noch einmal Revue passieren, so ist sofort offensichtlich, dass sie nach dem Femtosekundenpuls genau mit der Zyklotronfrequenz oszillieren.

Noch ein Kommentar zum elektrischen Fall: In der Literatur zur THz-Strahlung im elektrischen Fall ist für die Erzeugung von nichtlokalen Elektron-Loch-Paaren das Schlagwort „instantaner Polarisation“ üblich geworden. Insbesondere wurde die Unterscheidung zwischen diesem Verschiebungsstrom, der instantan dadurch entsteht, dass Elektron und Loch zu einander verschoben erzeugt werden, und dem Transportstrom beschleunigter Ladungen herausgearbeitet [Chu, Hu94, Hu95/1, Kuz93]. In unserem Modell der Voigt-Geometrie ist die instantane Polarisation nicht simuliert. Zwar ist an dem optischen Matricelement die nichtlokale Erzeugung von Elektron und Loch ablesbar und somit das Prinzip der instantanen Polarisation identifiziert (Abschn. 3.3), da das hier betrachtete Modell jedoch homogen angenommen ist, resultiert daraus kein Strombeitrag. Die THz-Oszillationen in gekreuzten Feldern gehen auf die Zyklotronbewegungen der Ladungsträger zurück, es handelt sich um Transportströme.

Da alle Experimente [Som96, Som94, Bau] bei tiefen Temperaturen durchgeführt wurden, ist in unseren Rechnungen die Phononbad-Temperatur auf $T = 0$ K gesetzt, d.h. allein die Phononemission ist in Betracht gezogen. Für die folgenden numerischen Ergebnisse wurde das Zeitintegral über die Rabi-Frequenz als 0.01π genommen und die volle Breite bei der Hälfte des Maximums der Intensität ist 141 fs (gaußsche Pulsform).

Wir beschränken uns auf die Darstellung des Stromes in x -Richtung (zeitliche Evolution, Spektrum) beschränkt, da sich hier die Beiträge der Elektronen und Löcher im besten Fall summieren, während sie in y -Richtung eher gegen einander arbeiten. Setzte man gleiche Massen voraus, verschwände der Strom in y -Richtung. Bei unterschiedlichen Massen laufen die Elektron- und Loch-Ströme außer Phase, es kommt in beiden Richtungen zu Schwebungen. Für die grundsätzliche Analyse genügt es, sich auf eine Richtung zu beschränken.

Zuerst soll der Einfluss des elektrischen Feldes auf das zeitaufgelöste Signal diskutiert werden. Dazu wird eine feste Verstimmung nahe der Phononschwelle gewählt und das elektrische Feld variiert (Abb. 3.10). Der besseren Übersicht halber sind in Abbildung 3.10 gleiche Massen für Elektronen und Löcher gewählt. Die Variation schlägt sich

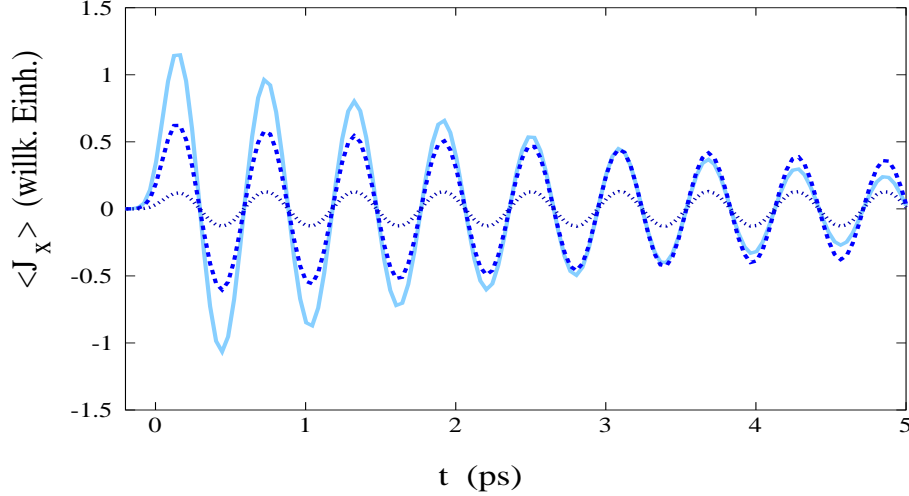


Abbildung 3.10: Zeitliche Evolution des Stromes für verschiedene elektrische Felder \mathcal{E} (kV/cm). x -Komponente; $\mathcal{E} = 0.5$ (kV/cm) gepunktet, $\mathcal{E} = 3$ (kV/cm) gestrichelt, $\mathcal{E} = 5.5$ (kV/cm) durchgezogen; $\mathcal{B} = 4$ T.

sowohl in der angeregten Amplitude als auch in ihrer anschließenden Dämpfung deutlich nieder. Ein wachsendes elektrisches Feld bricht immer stärker die Symmetrie, was in diesem Parameterbereich wiederum eine immer größere Stromamplitude zur Folge hat. Die Verstimmung ist mit 40 meV so gewählt, dass hier für das stärkste Feld die Phononschwelle (36 meV) soweit ausgeschmiert ist, dass die Dämpfung schon effektiv ist. Bei schwachen Feldern dagegen entspricht die Situation noch dem Szenario unterhalb der Schwelle, wo die Bewegung kaum gedämpft erscheint.

Dieses unterschiedliche Verhalten unter- und oberhalb der Schwelle ist ebenso Gegenstand von Abbildung 3.11, wo der mittlere Strom in x -Richtung als Funktion der Zeit und der Verstimmung dargestellt ist.

Unterhalb Schwelle bleibt die Dämpfung gering, so dass die Schwebung zwischen der Elektron- und der Loch-Zyklotronfrequenz gut zu beobachten ist (Elektron- und Leicht-Lochmasse unterschiedlich).

Oberhalb der Schwelle ist das Szenario komplizierter. Durch den Laserpuls gewisser energetischer Breite wird eine Vielzahl von Komponenten der Interband-Polarisation angeregt (das „Wellenpaket“). Da die optischen Matrixelemente, die die Anregung bestimmen, durch ihre unterschiedlichen Landau-Quantenzahlen gekennzeichnet sind, werden die einzelnen Komponenten nicht nur verschieden stark angeregt (Amplitude), sondern können auch unterschiedliche Vorzeichen tragen. Die unterschiedlichen Komponenten können sich also ganz oder teilweise auslöschen. Durch die quantenzahl-

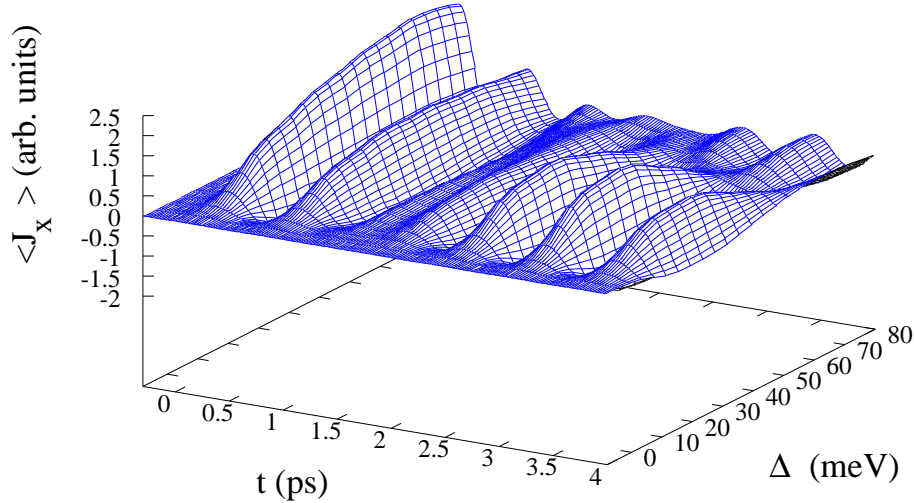


Abbildung 3.11: Zeitliche Evolution des Stromes aufgetragen gegen die Verstimmung Δ ; $\mathcal{E} = 4$ kV/cm, $\mathcal{B} = 4$ T; x -Komponente

abhängigen Relaxationszeiten ist darüberhinaus jede dieser Komponenten individuell gedämpft, so dass sich die Effekte von Anregung und Dämpfung zu einem komplexen Wechselspiel verflechten.

Man beobachtet beispielsweise, dass Oszillationen, die schon ausgedämpft schienen, wieder aufleben (revival phenomena). Zu einem bestimmten Zeitpunkt kommt es zu einer totalen Auslöschung aller Beiträge, nachdem aber stark gedämpfte Anteile verloschen sind, werden schwach gedämpfte Anteile, denen nun der Gegenstrom fehlt, erneut als Oszillationen sichtbar.

Dass solche schwachgedämpften Anteile auch für große Verstimmungen existieren, hat seine Ursache im Fehlen der Auswahlregeln in den Landau-Niveaus. Für eine große Verstimmung kann ein Teilchen (z.B. ein Elektron) hoch über der Schwelle erzeugt werden, während das mit ihm erzeugte Antiteilchen (im Beispiel also das Loch) in einem Zustand unterhalb der Schwelle erzeugt wird, oder umgekehrt. Wie schon in der Diskussion der Lebensdauern erwähnt, ist dies auch der Grund, weshalb eine effektive Dämpfung schon bei einer Verstimmung von nur einer LO-Phononenergie einsetzt. Ein ebensolches Ein-Phonon-Schwellenverhalten wird auch für den Fall der Bloch-Oszillationen berichtet [vPle94].

Noch deutlicher zeigen sich die erwähnten Phänomene in der Fourier-Darstellung des Stromes in Abbildung 3.12. Sowohl die Elektron- als auch die Loch-Zyklotronfrequenz zeigen sich als separat ausgeprägte Maxima für kleine Verstimmungen. Bei einer

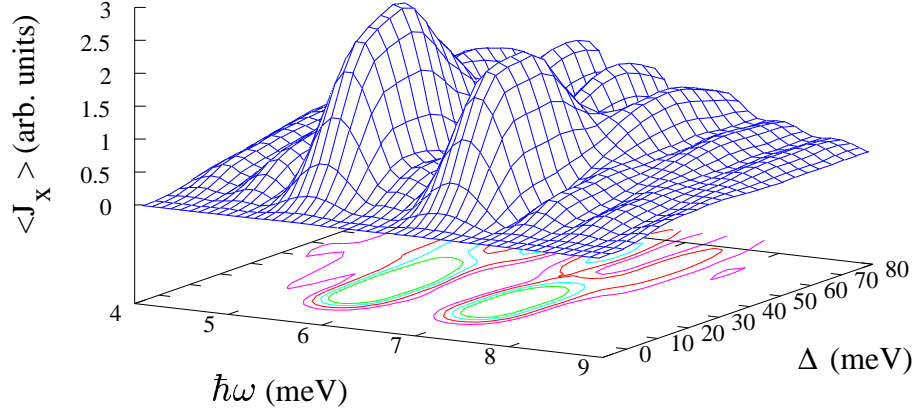


Abbildung 3.12: Spektrum der des Stromes aufgetragen gegen die Verstimmung Δ ; $\mathcal{E} = 4$ kV/cm, $\mathcal{B} = 4$ T, x -Komponente

Verstimmung von etwa einer LO-Phononenergie jedoch wird die Höckerstruktur mit dem Einsetzen effektiver Dämpfung deutlich breiter und der Wettbewerb verschiedener Beiträge der Intersubband-Polarisation eröffnet den Übergang von einer simplen Höcker-Struktur zu einer Höcker-Tal-Höcker-Formation jeweils um die charakteristische Zyklotronfrequenz herum. Jede exponentiell gedämpfte Intraband-Polarisations-Komponente im Zeitraum führt zu einer Lorentz-Kurve im Frequenzraum. Ebenso wie die exponentielle Dämpfung von der Quantenzahl-Kombination abhängt, gilt dies auch für die Breite der Lorentz-Kurve. Die Frage des Vorzeichens überträgt sich. Eine Höcker-Tal-Höcker-Struktur versteht sich im trivialsten Fall als die Summe zweier verschieden breiter Lorentz-Kurven mit unterschiedlichen Vorzeichen. Die zusätzlichen Satelliten hingegen haben keine physikalische Bedeutung, sondern sind numerische Artefakte der Fourier-Transformation.

Wenn die Parameter dieser theoretischen Analyse auch nicht mit denen des Experiments [Som94] identisch sind, da das intrinsische Oberflächen-Verarmungsfeld ($\vec{\mathcal{E}}$) nicht bekannt ist und die kleinen Magnetfelder zu sehr hohem numerischen Aufwand führten, lassen sich dennoch ähnliche qualitative Beobachtungen machen: Oszillationen mit den Zyklotronfrequenzen von Elektron und Leicht-Loch und ein Abfall des Signals auf der Pikosekunden-Zeitskala.

In Abbildung 3.13 ist das zeitlich integrierte Amplitudenquadrat der Zeitableitung des Stromes, eine Größe die direkt proportional zum abgestrahlten Signal ist, aufgetragen und wiederum zeigen sich Ähnlichkeiten mit dem experimentellen Befund. Einem Maximum für kleine Verstimmungen bei etwa 25 – 30 meV folgt ein Einbruch, der sich durch die starke Zunahme der Dämpfung oberhalb der Phononschwelle er-

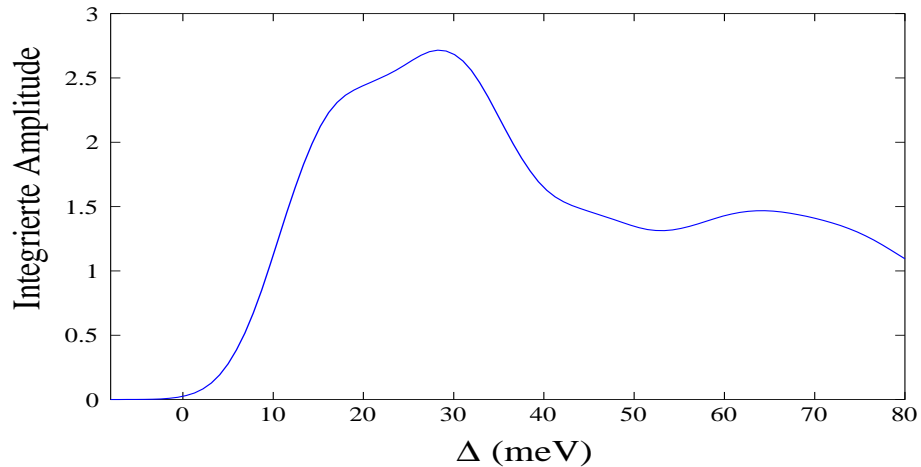


Abbildung 3.13: Zeitlich integriertes Amplitudenquadrat der Ableitung des Stromes als Funktion der Verstimmung Δ ; $\mathcal{E} = 4$ kV/cm, $\mathcal{B} = 4$ T

klärt. In den experimentellen Daten wird das Minimum der Delle der zweifachen Phononenergie zugeschrieben und dann mit Hilfe der Magneto-Phonon-Resonanzen erklärt, falls Elektron und Loch oberhalb der Schwelle erzeugt werden. Wie aber zuvor ausführlich erläutert, zeigt unsere Analyse eindeutig, dass diese Auswahlregel für den Fall $\mathcal{E} \neq 0$ gerade nicht mehr tragfähig sind. Um diesen experimentellen Befund zu erklären, müsste man also annehmen, bei dem Verarmungsfeld handle es sich nur um ein sehr schwaches Feld. Da wir aber weiterhin gezeigt haben, dass ein elektrisches Feld unbedingt nötig ist, damit das System überhaupt strahlen kann, müssen die experimentellen Beobachtungen anders gedeutet werden.

Vergleiche mit den experimentellen Befunden gestalten sich nicht zuletzt deshalb schwierig, weil das elektrische Verarmungsfeld die große Unbekannte darstellt. Geplante Experimente mit kontaktierten Proben, wo also das Feld von außen bestimmt und variiert werden kann [Bau], sollten hier weitere Aufschlüsse ermöglichen.

Kapitel 4

Klassische Polaronen im elektrischen Feld

Seit Anfang der neunziger Jahre ist beobachtet und verstanden, dass kohärente optische Phononen Oszillationen im THz-Bereich erzeugen. Viel öfter liegt jedoch die Situation vor, dass die Elektronen für die Erzeugung von THz-Oszillationen verantwortlich sind, und einem inkohärenten Phononenbad die Rolle des Spielverderbers zukommt, handelt es sich bei der Streuung mit Phononen doch oft um einen der effizientesten Prozesse zur Dephasierung und Dämpfung der THz-Signale. Für die Vielzahl von Referenzen sowohl für die phononischen als auch elektronischen Mechanismen sei auf die Einleitung (Kap. 1) verwiesen.

Da mag es nun zunächst paradox klingen, wenn die Untersuchungen dieses Kapitels einem System gelten, indem die Phononen als Ursache dafür fungieren, dass die Elektronen THz-Oszillationen emittieren. Tatsächlich war es ja eines der Hauptziele des Kapitels 3 die Zeitskala zu bestimmen, auf der die Dämpfung durch die Phononen stattfindet. Dadurch dass die dort berechneten Lebenszeiten weitaus länger als die Periodendauer des Oszillationen waren, erfuhr die Annahme, die Phononen seien als inkohärentes Bad aufzufassen, *a posteriori* ihre Bestätigung.

Anders wird in dem folgenden klassischen Modell verfahren: Hier wird der Kopplung an das System der Phononen solche Bedeutung beigemessen, dass es als ein kohärenter Teil des Systems betrachtet wird. Der scheinbare Widerspruch, welche Rolle den Phononen denn nun zukommt, wird also dahingehend aufgelöst, dass es sich dabei um eine Frage der Kopplungsstärke handelt.

Erzeugt ein optischer Puls Ladungsträger in Anwesenheit eines elektrischen Feld, so ist dieses Feld — wie in Kapitel 3 gesehen — dafür verantwortlich, dass die Erzeugung von Elektron und Loch nichtlokal vonstatten geht, soll heißen, die beiden Ladungs-

träger werden nicht am gleichen Ort erzeugt. Das hat eine „instantane Polarisation“ zur Folge [Yam, Che, Yab, Hu91, Chu, Kuz93, Hu94, Hu95/1], die sich als breitbandiger THz-Puls messen lässt (Verschiebungsstrom). Sind die Ladungsträger einmal da, so beschleunigt sie das elektrische Feld. Auch mit diesem Transportstrom geht THz-Strahlung einher [Kuz93, Hu94, Hu95/1].

Hier sei der Hinweis angebracht, dass dem klassischen Argument beschleunigter Ladungen mit einiger Vorsicht begegnet werden sollte: In Kapitel 3 wurde gezeigt, dass das elektrische Feld zwingend nötig war, damit es zur Abstrahlung kommt. Ein Teilchen allein im magnetischen Feld hingegen, strahlt — obgleich beschleunigt — nicht. Betrachtet man also das Elektron isoliert im elektrischen Feld, so kommt es also zwar zu breitbandigen THz-Pulsen, jedoch nicht zu Oszillationen wohldefinierter Frequenz. In neueren Arbeiten [Lei99, Lei00] wurde nun aber die Frage angerissen, von welcher Art die beobachteten THz-Oszillationen sind.

Typischerweise führt eine gekoppelte Behandlung von Elektronen und Phononen im Rahmen quantenkinetischer Theorien auf nicht-markovsche Gleichungen mit Gedächtnis [Schi, Hau96] für die Elektronen, die kohärente Phononamplitude und die inkohärenten Phononen. Ein elektrisches Feld — wenn auch unter anderer Fragestellung — wurde in [Her] berücksichtigt. Für das grundsätzlichen Verständnis kann hier ein vereinfachtes klassisches Modell Einblicke eröffnen, wie ein Polaron, also ein Elektron mit der es umgebenden Phononwolke, zu THz-Strahlung führen könnte. Ziel dieses Kapitels ist es zu zeigen, dass es zu einer direkten elektronischen Erzeugung von Oszillationen mit der LO-Phononfrequenz kommen kann.

Dazu wird ein klassisches Polaronmodell, wie es hinsichtlich ballistischer und dissipativer Bewegung untersucht wurde [Ban93, Ban95], in zwei Richtungen erweitert: Statt der Bewegung *eines* Elektrons entlang der kolinearen Achsen von Anfangsgeschwindigkeit und elektrischer Feldrichtung wird nun durch Verwendung spezieller — aber sehr wohl physikalisch motivierter — Anfangsbedingungen nicht nur *ein* Elektron betrachtet, sondern das entsprechende Vielteilchen-Problem ohne weitere Näherungen gelöst. Zum anderen wird die Einschränkung der uniaxialen Bewegung aufgehoben und beliebige Richtungskombinationen von Feld, Anfangskonfiguration und Anfangsgeschwindigkeit zugelassen.

Die ersten drei Abschnitte legen die Theorie dar. Ausgehend von der Lagrange-Funktion für Elektronen und ein Phononfeld im elektrischen Feld zeigt Abschnitt 4.1 wie man durch Elimination der Phononvariablen zu einem geschlossenen Gleichungssystem für die Elektronen kommt, in Abschnitt 4.2 gelingt die Reduktion dieses Gleichungssystems durch Ausnutzung einer Ausgangskonfiguration der Elektronen auf einem Gitter zu nur einer einzigen Gleichung. Das in dieser Gleichung auftauchende

effektive Potenzial wird in Abschnitt 4.3 analysiert. Die Abschnitte 4.4 -4.6 sind der Berechnung der zeitlichen Evolution von Koordinate, Geschwindigkeit und Beschleunigung gewidmet. Insbesondere der Beschleunigung als proportional zur Abstrahlung gilt die Aufmerksamkeit und die Analyse im Frequenzraum. Abschnitt 4.4 vergleicht die aus dem Ein-Elektron-Modell [Ban93, Ban95] bekannten Regime diffusiver und ballistischer Bewegung mit den Ergebnissen des Vielteilchen-Modells und identifiziert Gemeinsamkeiten und Unterschiede. Im diffusiven Regime zeigen sich hier die THz-Oszillationen. Dass dieses Verhalten nicht pathologisch im Sinne des uniaxialen Modells ist, zeigt die Erweiterung auf willkürliche Richtungen des elektrischen Feldes bezüglich des Gitter der Elektronen-Anfangskonfiguration (Abschn. 4.5). Während bis dahin keine Anfangsgeschwindigkeiten einbezogen worden sind, wird im Abschnitt 4.6 etwas mehr Anschluss an experimentellen Gegebenheiten gesucht. Es werden GaAs-Parameter für die Kopplung gewählt, und die optische Anregung oberhalb der Bandkante wird in Anfangsgeschwindigkeiten übersetzt. Allerdings kann man nicht erwarten, im Rahmen dieses Modells quantitative Übereinstimmung mit experimentellen Daten zu erhalten. Abschnitt 4.7 greift die Frage auf, welcher Art der hier nicht behandelte phononische Beitrag zu dem THz-Signal ist, wie er in [Lei99, Lei00] gefunden wurde, und räumt mit dem Missverständnis auf, die auftretende LO-Phononfrequenz zwingt dazu, diesen Beitrag den LO-Phononen zuzuschreiben.

Im diesem Kapitel sind die Längen durchgehend in Einheiten der Kristallgitterkonstante von GaAs $a = 0.56$ nm angegeben. Zeiten sind in Einheiten der inversen Phononkreisfrequenz $1/\omega_{LO} \approx 18.6$ fs aufgetragen.

Die zentralen Gedanken dieses Kapitels finden sich in [Mein01].

4.1 Ein klassisches Polaronmodell

Das Polaronmodell wird aus den folgenden Bausteinen konstruiert: (i) einer Vielzahl von Elektronen, die als klassische Punktteilchen der Koordinate \vec{x}_i , und den für alle Teilchen gleichen Parametern der Masse m und der Ladung e beschrieben werden; (ii) einem die negativen Ladungen kompensierenden positiven Hintergrund (optisch werden Elektron-Loch-Paare erzeugt, aufgrund ihrer großen Masse nehmen die schweren Löcher nicht an der Dynamik teil, sie sind zu dem positiven Hintergrund ausgeschmiert); (iii) Phononen, die durch ein elastisches Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{x})$ beziehungsweise ein Polarisierungs-(Dipol-)Feld $\vec{P}(\vec{x}) = \frac{e}{v}\vec{u}(\vec{x})$ simuliert werden (v bezeichnet das Volumen pro Dipol, und M die Ionenmasse); und (iv) einem externen elektrischen Feld \vec{E} . Die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Phononen wird durch die Fröhlich-Kopplung beschrieben. Setzt man diese Bausteine zusammen, so erhält man für die Lagrange-Funktion

$$\begin{aligned}
L = & \sum_j^N \left(\frac{m\dot{\vec{x}}_j^2}{2} - eV_{ext}(\vec{x}_j) \right) - \frac{1}{2\epsilon_\infty} \sum_{j \neq j'}^N e^2 \mathcal{V}(\vec{x}_j - \vec{x}_{j'}) \\
& + \frac{M}{2v} \int d\vec{x} \left(\dot{\vec{u}}(\vec{x})^2 - \omega_0^2 \vec{u}(\vec{x})^2 \right) \\
& - \frac{1}{2\epsilon_\infty} \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \mathcal{V}(\vec{x} - \vec{x}') \nabla \vec{P}(\vec{x}) \nabla' \vec{P}(\vec{x}') \\
& + \frac{1}{\epsilon_\infty} \int d\vec{x} \left(\nabla \vec{P}(\vec{x}) \right) V_{tot}(\vec{x}) \quad , \tag{4.1}
\end{aligned}$$

wobei die zusätzliche Definition

$$V_{tot}(\vec{x}) = V_{ext}(\vec{x}) + e \sum_j \mathcal{V}(\vec{x} - \vec{x}_j) \tag{4.2}$$

Eingang findet. \mathcal{V} ist das Coulomb-Wechselwirkungspotenzial der Elektronen. Im externen Potenzial sind dabei Terme vereinigt, die einerseits vom externen elektrischen Feld \vec{E} , andererseits von der Ladungsdichte des positiven Hintergrundes $\rho_{bg}(\vec{x})$ herühren:

$$V_{ext}(\vec{x}) = \int d\vec{x}' \mathcal{V}(\vec{x} - \vec{x}') \rho_{bg}(\vec{x}') - \vec{x} \vec{E} = U_{bg}(\vec{x}) - \vec{x} \vec{E} \quad . \tag{4.3}$$

Die Dielektrizitätskonstante ϵ_∞ berücksichtigt die Polarisierbarkeit der Valenzelektronen.

Im Einzelnen beschreiben die Terme in Gleichung 4.1 in der Reihenfolge ihres Auftretens: 1. Zeile: Kinetische Energie der Elektronen, Wechselwirkung der Elektronen

mit dem externen Potenzial (externes Feld plus positiver Hintergrund), Elektron-Elektron-Wechselwirkung; 2. Zeile: Kinetische und potentielle Energie des Phonon-Feldes; 3. Zeile: Phonon-Phonon-Wechselwirkung; 4. Zeile: Wechselwirkung des Phononfeldes mit den Elektronen, dem positiven Hintergrund und dem externen Feld.

Die Ladungsneutralität sichert man durch:

$$\int d\vec{x} \rho_{bg}(\vec{x}) = -Ne \quad . \quad (4.4)$$

Für das Wechselwirkungspotenzial wählen wir

$$\mathcal{V}(\vec{x}) = \frac{1}{|\vec{x}|} e^{-\mu|\vec{x}|} \quad , \quad (4.5)$$

wobei durch den Regularisierungsfaktor μ die Konvergenz der Reihen in Coulomb-Systemen erzwungen wird. Auf einen zusätzlichen Debye-Abschneideterm (Debye cut off) in der Wechselwirkung zwischen Elektronen und Phononen wird später noch einzugehen sein (Abschn.4.3). Der Ausdruck soll so verstanden werden, dass am Ende des Verfahrens der Grenzübergang $\mu \rightarrow 0$ durchzuführen ist.

Da allein der longitudinale Anteil des Phononfeldes mit den Elektronen in Wechselwirkung steht, wird es im Weiteren genügen, ausschließlich diese longitudinalen Freiheitsgrade zu berücksichtigen. Die gekoppelten Bewegungsgleichungen lauten dann

$$m\ddot{\vec{x}}_j = -e\nabla V_{ext}(\vec{x}_j) - e^2\nabla_j \sum_{j'(\neq j)} \mathcal{V}(\vec{x}_j - \vec{x}_{j'}) - \frac{e^2}{\epsilon_\infty v} \int d\vec{x} \nabla_x \vec{u}_l(\vec{x}) \nabla_j \mathcal{V}(\vec{x} - \vec{x}_j(t)) \quad (4.6)$$

$$\ddot{\vec{u}}_l + \omega_{LO}^2 \vec{u}_l = -\frac{e}{\epsilon_\infty M} \nabla V_{tot}(\vec{x}) \quad , \quad (4.7)$$

wobei die Phonon-Phonon-Wechselwirkung in $\omega_{LO}^2 \equiv \omega_0^2 + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty M v}$ integriert wurde. Durch die formale Lösung der Gleichung (4.7) lässt sich nun das Gleichungssystem der Elektronen von der Phonongleichung entkoppeln. Da auch der positive Hintergrund erst gemeinsam mit den Elektronen erzeugt wird, liegt zum Zeitpunkt $t = 0$ die Situation statisch polarisierter Phononen in Anwesenheit eines externen Feldes vor, so dass die Anfangsbedingungen durch $\nabla \vec{u}_l = 0$; $\dot{\nabla} \vec{u}_l = 0$ gegeben sind. Mit Hilfe der bekannten greenschen Funktion des harmonischen Oszillators ist die Lösung

$$\nabla \vec{u}_l(\vec{x}, t) = \frac{-e}{\epsilon_\infty \omega_{LO} M} \int_0^t dt' \sin(\omega_{LO}(t - t')) \nabla_x^2 \left[e \sum_{j'} \mathcal{V}(\vec{x} - \vec{x}_{j'}) + U_{bg}(\vec{x}) \right] \quad . \quad (4.8)$$

Das Einsetzen dieses Ergebnisses in die newtonschen Gleichungen für die Elektronen führt zu einem geschlossenen Gleichungssystem

$$m\ddot{\vec{x}}_j(t) = e\vec{E} - e\nabla U_{bg}(\vec{x}_j) - e^2\nabla_j \sum_{j'(\neq j)} \mathcal{V}(\vec{x}_j(t) - \vec{x}_{j'}(t))$$

$$\begin{aligned}
& +c \int_0^t dt' \sin(\omega_{LO}(t-t')) \int d\vec{x} \frac{\partial}{\partial \vec{x}_j(t)} \mathcal{V}(\vec{x} - \vec{x}_j(t)) \\
& \times \nabla_x^2 \left[\sum_{j'} \mathcal{V}(\vec{x} - \vec{x}_{j'}(t')) + \frac{1}{e} U_{bg}(\vec{x}) \right] . \quad (4.9)
\end{aligned}$$

Dabei ist $c = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty^2 \omega_{LO} M v}$ ein Parameter für die Kopplungsstärke.

Man muss sich hierbei vergegenwärtigen, dass obwohl nunmehr die Phononvariable aus den Gleichungen eliminiert worden ist, es sich noch immer um ein System von Gleichungen handelt, die sowohl durch die direkte Elektron-Elektron- als auch über die phononvermittelte Wechselwirkung miteinander gekoppelt sind.

Obwohl wir im weiteren nur noch dem abgekoppelten Elektronenanteil unsere Aufmerksamkeit schenken werden, sei hier der Vollständigkeit halber auch die Lösung für das Verschiebungsfeld angegeben. Sie lautet unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen $\vec{u}_l(0) = \frac{e}{\epsilon_\infty M \omega_{LO}^2} \vec{E}(\vec{x})$ und $\dot{\vec{u}}_l(0) = 0$:

$$\vec{u}_l(\vec{x}, t) = c_1 \vec{E} - c_2 \sum_{j'} \int_0^t dt' \sin(\omega_{LO}(t-t')) \nabla_x V(\vec{x} - \vec{x}_{j'}(t')) \quad , \quad (4.10)$$

wobei zu Vorfaktoren zusammengefasst wurden: $c_1 = \frac{e}{\epsilon_\infty M \omega_{LO}^2}$ und $c_2 = \frac{e}{\epsilon_\infty \omega_{LO} M}$.

Wir beschließen diesen Absatz mit dem Hinweis, dass sich im Weiteren unsere Betrachtungen auf ein konstantes externes elektrisches Feld $\vec{E} = \vec{\mathcal{E}}$ beschränken.

4.2 Ein lösbares Modell

Obwohl die Phononvariable nunmehr aus dem Gleichungssystem für die Elektronen eliminiert worden ist, sieht man sich dennoch mit einem Vielteilchen-Problem konfrontiert, das sich jeder numerischen direkten Lösung verwehrt. Man muss sich vor Augen führen, dass jedes Elektron durch eine Bewegungsgleichung repräsentiert wird, das heisst selbst bei geringen Dichten von 10^{10} Teilchen/cm³ ist dies eine Aufgabe, die weit über das numerische Machbare hinaus- und am eigentlichen Ziel der Simulation des optisch angeregten Halbleiters vorbeigeht. Gerade aber die Simulation dieser paradigmatischen Modellanordnung weist einen Weg aus dem Dilemma: Eine oftmals benutzte Annahme der Halbleiteroptik ist es, sich die durch die Anregung mit einem kurzen Laserpuls erzeugte Elektronenverteilung — in einer gewissen, für das Experiment zentralen Region — homogen zu denken. Für den positiven Hintergrund versteht sich das von selbst; die elektronischen Punktteilchen kann man sich dagegen als auf einem kubischen Gitter angeordnet vorstellen. Dieses kubische Gitter wird beschrieben durch den Gittervektor \vec{R} mit der Gitterkonstante R , und für die Koordinate zum Zeitpunkt $t = 0$ der Erzeugung hat man $\vec{x}_{\vec{R}}(0) = \vec{R}$. Der Wert der Elektronengitterkonstante R ist gegeben durch die Elektronendichte. Ohne dass es darüberhinaus weiterer Annahmen bedürfte, ist damit die Translationsinvarianz der Lösungen gewährleistet:

$$\vec{x}_{\vec{R}}(t) = \vec{x}_{\vec{R}'}(t) + \vec{R} - \vec{R}' \quad , \quad \vec{u}_l(\vec{x} + \vec{R}, t) = \vec{u}_l(\vec{x}) \quad . \quad (4.11)$$

Mit anderen Worten sind es allein die speziell gewählten Anfangsbedingungen, die garantieren, dass die Gitterverteilung der Elektronen erhalten bleibt, weitere, zusätzliche Zwangsbedingungen sind nicht erforderlich. Darüberhinaus ist es aufgrund von Symmetrieargumenten sofort einsichtig, dass die direkte Elektron-Elektron-Wechselwirkung verschwindet, so dass man mit der Gleichung

$$\begin{aligned} m\ddot{\vec{x}}(t) &= e\vec{\mathcal{E}} + c \int_0^t dt' \sin(\omega_{LO}(t - t')) \nabla_{\vec{x}(t)} \int d\vec{x} \mathcal{V}(\vec{x} - \vec{x}(t)) \\ &\times \nabla_{\vec{x}}^2 \sum_{\vec{R}} \left[\mathcal{V}(\vec{x} - \vec{x}(t') - \vec{R}) - \frac{1}{v_R} \int_{v_R} d\vec{\xi} \mathcal{V}(\vec{x} - \vec{\xi} - \vec{R}) \right] \end{aligned} \quad (4.12)$$

verbleibt, in der $v_R = R^3$ das Volumen der Elementarzelle des Gitters \vec{R} bezeichnet. Der Term des Hintergrundpotenzials wurde dabei so geschrieben, dass seine Struktur unter der Summe der der Elektronen gleicht. Durch eine schlichte Umorganisation der Gleichung gelingt die Einführung eines modifizierten Potenzials

$$\bar{V}(\vec{y}) = -\frac{1}{4\pi} \int d\vec{x} V(\vec{y} - \vec{x}) \nabla^2 V(\vec{x}) \quad , \quad (4.13)$$

mit dessen Hilfe die Gleichung nun lautet:

$$\begin{aligned}
 m\ddot{\vec{x}}(t) &= e\vec{\mathcal{E}} + 4\pi c \int_0^t dt' \sin(\omega_{LO}(t-t')) \\
 &\quad \times \nabla_{\vec{x}(t)} \sum_{\vec{R}} \left[\bar{V}(\vec{x}(t) - \vec{x}(t') - \vec{R}) - \frac{1}{v_R} \int_{v_R} d\vec{\xi} \bar{V}(\vec{x}(t) - \vec{\xi} - \vec{R}) \right] .
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Hierbei wurde in den letzten beiden Gleichungen bereits zur weniger schwerfälligen Notation $\vec{x}(t) \equiv \vec{x}_{\vec{R}}(t)|_{\vec{R}=0}$ gewechselt.

Diese Integro-Differenzial-(Vektor-) Gleichung beschreibt ein Vielteilchen-Problem: Im Gedächtniskern des Zeitintegrals taucht nicht nur die retadierte, phononvermittelte Selbstwechselwirkung ($\vec{R} = 0$) auf, sondern auch die phononvermittelte Wechselwirkung mit allen anderen Elektronen (Summation über $\vec{R} \neq 0$). Es ist eine bekannte Tatsache, dass man auf solche Arten von nichtlokalen Gleichungen mit Gedächtnis geführt wird, wenn man sich daran macht, ein Subsystem (hier die Elektronen) durch Eliminierung der Variablen eines anderen Subsystems (hier die Phononen) zu untersuchen.

Auch in dieser letzten Form wollen wir der Vollständigkeit halber die Gleichung für den longitudinalen Anteil des Phononfeldes angeben:

$$\vec{u}_l(\vec{x}, t) = c_1 \vec{\mathcal{E}} - c_2 \int_0^t dt' \sin(\omega_{LO}(t-t')) \nabla_x \sum_{\vec{R}} V(\vec{x} - \vec{x}(t') - \vec{R}) . \tag{4.15}$$

Da die longitudinalen Phononen jedoch nicht an das transversale elektro-magnetische Feld koppeln, strahlen sie im Fernfeld nicht. Dies ist der Grund, weshalb wir uns im weiteren ausschließlich mit dem elektronischen Anteil beschäftigen. Auf den phononischen Anteil kommen wir noch einmal in Abschnitt 4.7 zurück.

4.3 Das effektive Potenzial

Zwei das Potenzial betreffende Fragen bedürfen noch spezieller Aufmerksamkeit: Welche Form des Potenzials soll verwendet werden und wie sind die Reihen zu behandeln? Aufgrund der Singularität im Ursprung führt die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in der Coulomb-Form

$$-\frac{1}{\epsilon_\infty} \int d\vec{x} \frac{\nabla \vec{P}(\vec{x}) e}{|\vec{x} - \vec{x}_i|} \quad (4.16)$$

zu nicht wohldefinierten Ausdrücken in Gleichung (4.12). Traditionsgemäß wird diese Schwierigkeit Debye folgend dadurch umgangen, dass man den Phononwellenvektor auf die erste Brillouin-Zone beschränkt und somit die richtige Anzahl der Freiheitsgrade erhält (Debye-Trick). Diese Beschränkung im Fourier-Raum ist äquivalent dazu, im Realraum das Coulomb-Potenzial durch ein nichtsinguläres Potenzial zu ersetzen. Wir tun dies in der Form

$$\mathcal{V}(r) = \frac{1 - e^{-k_D r}}{r} e^{-\mu r} \quad (4.17)$$

mit $k_D = \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{a} \approx \frac{3.898}{a}$ (a ist die Kristallgitterkonstante. Damit erhalten wir — für kleine μ — den analytischen Ausdruck

$$\bar{\mathcal{V}}(r) = \left[\frac{1 - e^{-k_D r}}{r} - \frac{k_D e^{-k_D r}}{2} \right] e^{-\mu r} \quad (4.18)$$

Hierbei ist zu betonen, dass dem Abschneideverfahren eine gewisse Willkür zugrunde liegt, so dass k_D von der richtigen Größenordnung ist, aber keinerlei Anspruch erhebt, die allein gültige Wahl zu sein. Das zweite Problem befasst sich mit der Frage, wie die Reihe

$$\sum_{\vec{R}} \left[\bar{V}(\vec{x} - \vec{x}' - \vec{R}) - \frac{1}{v_R} \int_{v_R} d\xi \bar{V}(\vec{x} - \vec{\xi} - \vec{R}) \right] = \sum_{\vec{R}} W(\vec{x} - \vec{R}, \vec{x}') \quad (4.19)$$

zu berechnen ist. Benutzt man die poisonsche Formel

$$\sum_{\vec{R}} f(\vec{R}) = \frac{(2\pi)^3}{v} \sum_{\vec{Q}} \hat{f}(\vec{Q}) \quad (4.20)$$

so lässt sich nach Ewald [Bor54] die Reihe durch Addition und Subtraktion der gleichen Größe umordnen:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{R}} W(\vec{x} - \vec{R}, \vec{x}') &= \sum_{\vec{R}} \left(\bar{V}(\vec{x} - \vec{x}' - \vec{R}) - \frac{F_\mu(\alpha, |\vec{x} - \vec{x}' - \vec{R}|)}{|\vec{x} - \vec{x}' - \vec{R}|} \right) \\ &\quad + \sum_{\vec{Q} \neq 0} 4\pi \frac{e^{-\frac{Q^2}{4\alpha^2}}}{Q^2 + \mu^2} e^{-i\vec{Q}(\vec{x} - \vec{x}')} \quad (4.21) \end{aligned}$$

Dabei ist

$$F_\mu(\alpha, x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\alpha x} dy e^{-y^2 - \frac{\mu^2 x^2}{4y^2}} \quad (4.22)$$

die Yukawa-Verallgemeinerung der Fehlerfunktion ($\lim_{\mu \rightarrow +0} F_\mu(\alpha, x) \equiv \operatorname{erf}(\alpha x)$). Der $\vec{Q} = 0$ Term wird durch die Hintergrundladung kompensiert. Für die Numerik ist dabei entscheidend, dass beide Teile (sogar für $\mu = +0$) schnell konvergieren; in der ersten Zeile ist dies im gleichen asymptotischen Verhalten begründet, wohingegen in der zweiten Zeile der Gauss-Faktor den Ausschlag gibt. Zwar hängt das Potenzial vom Hilfsparameter α ab, für die physikalisch letztendlich relevante Größe der Kraft ist dies jedoch nicht der Fall.

Die numerische Auswertung des effektiven Potenzials $\sum_{\vec{R}} W(\vec{x} - \vec{R}, \vec{x}')$ wird nun im Folgenden dargestellt. Dabei ist zu beachten, dass, obwohl das summierte Potenzial entlang einer Elektronkristallgitterachse dargestellt ist, die Summen über alle drei Dimensionen ausgeführt wurden. Abbildung 4.1 gibt Antwort auf die Frage, inwiefern sich das summierte Potenzial mit der Elektrongitterkonstante verändert, d.h. welchen Einfluss die Elektrondichte hat.

Um den Ort zu beschreiben, um den ein Einteilchen-Potenzial lokalisiert ist, werden wir im Folgenden den Begriff „Lokalisation“ verwenden. Die Lokalisationen sind durch die Elektron-Gitterpunkte \vec{R} gegeben. Bei dem summierten effektiven Potenzial handelt es sich um die Überlagerung aller identischen Einteilchen-Potenziale verschiedener Lokalisationen. Daher ist das summierte effektive Potenzial hinsichtlich \vec{R} periodisch. Es wird jeweils nur eine Periode von der Lokalisation in 0 bis jeweils zu der in R aufgetragen. Die Elektrongitterkonstanten R (angegeben in Einheiten der GaAs-Gitterkonstanten $a = 0.56$ nm) wurden dabei von der niedrigen experimentell realisierten Elektrondichte [Lei99, Lei00] bis zu einer unrealistisch hohen Modelldichte ($R = 6.28$) variiert ($R = 225, 30, 20, 6.28$). Durch die schrittweise Ausschnittsvergrößerung lässt sich nun eine dichteabhängige Klassifikation der summierten effektiven Potenziale vornehmen, die wir uns im Anschluss bei der numerischen Auswertung der Bewegungsgleichungen zunutze machen werde. Für die größeren Elektrongitterkonstanten R (geringere Dichten) wird die Region nahe einer Lokalisation eines Einteilchen-Potenzials (in Abbildung 4.1 $x \ll R$) beinahe ausschließlich durch dieses Potenzial determiniert. Andere Beiträge zum summierten Potenzial werden erst in einer Distanz $x \approx 0.5R$ sichtbar. Nur für die höchste untersuchte Dichte $R = 6.28$ ist der Einfluss von Einteilchen-Potenzialen entfernterer Lokalisation deutlich an der Abweichung von den anderen Kurven auch um 0 und durch die größere Steigung sichtbar und keinesfalls vernachlässigbar. Die Tatsache, dass in allen Rechnungen für den Parameter α der gleiche Wert benutzt wurde, erlaubt hier trotz der α -Verschiebung der Potenziale einen bequemen Vergleich.

Um den verschwindenden Einfluss der Einteilchen-Potenziale entfernterer Lokalisation augenfällig werden zu lassen, wird das summierte effektive Potenzial mit einem Potenzial verglichen, das sich aus der Überlagerung allein der nächsten Einteilchen-Potenziale (nearest neighbour)

$$\mathcal{V}_{nn}(x) = \mathcal{V}(x - R_1) + \mathcal{V}(x - R_2) \quad R_1 < x < R_2 \quad (4.23)$$

zusammensetzt (hier eindimensional dargestellt). Für die experimentell realisierte Dichte zeigt sich dabei keinerlei Abweichung, und für $R = 20$ beschränken sich die geringfügigen Abweichungen auf die Gebiete der Lokalisationen, wohingegen für die höchste Dichte ($R = 6.28$) die Nächste-Nachbar-Näherung offensichtlich versagt.

Hierbei sei angemerkt, dass für die Darstellung des Vergleiches entlang einer Elektronkristallachse das Nächste-Nachbar-Potenzial aus lediglich zwei überlagerten Zentren bestand, für die numerische Auswertung der Integro-Differenzial-Gleichung hingegen wurde eine dreidimensionale Nächste-Nachbar-Näherung verwendet. Das Potenzial innerhalb des Elektrongitterkubus wurde also aus einer Überlagerung von den acht Einteilchen-Potenzialen in den Eckpunkten errechnet, während bei der Berechnung an den Kubusoberflächen zusätzlich Symmetrieargumente zu Hilfe genommen wurden. Dass es sich dabei um eine tragfähige und numerisch effiziente Methode handelt, wurde durch die testweise Verwendung einer zusätzlichen „Schale“, d.h. einer Überlagerung aus insgesamt 27 Einteilchen-Potenzialen, abgesichert.

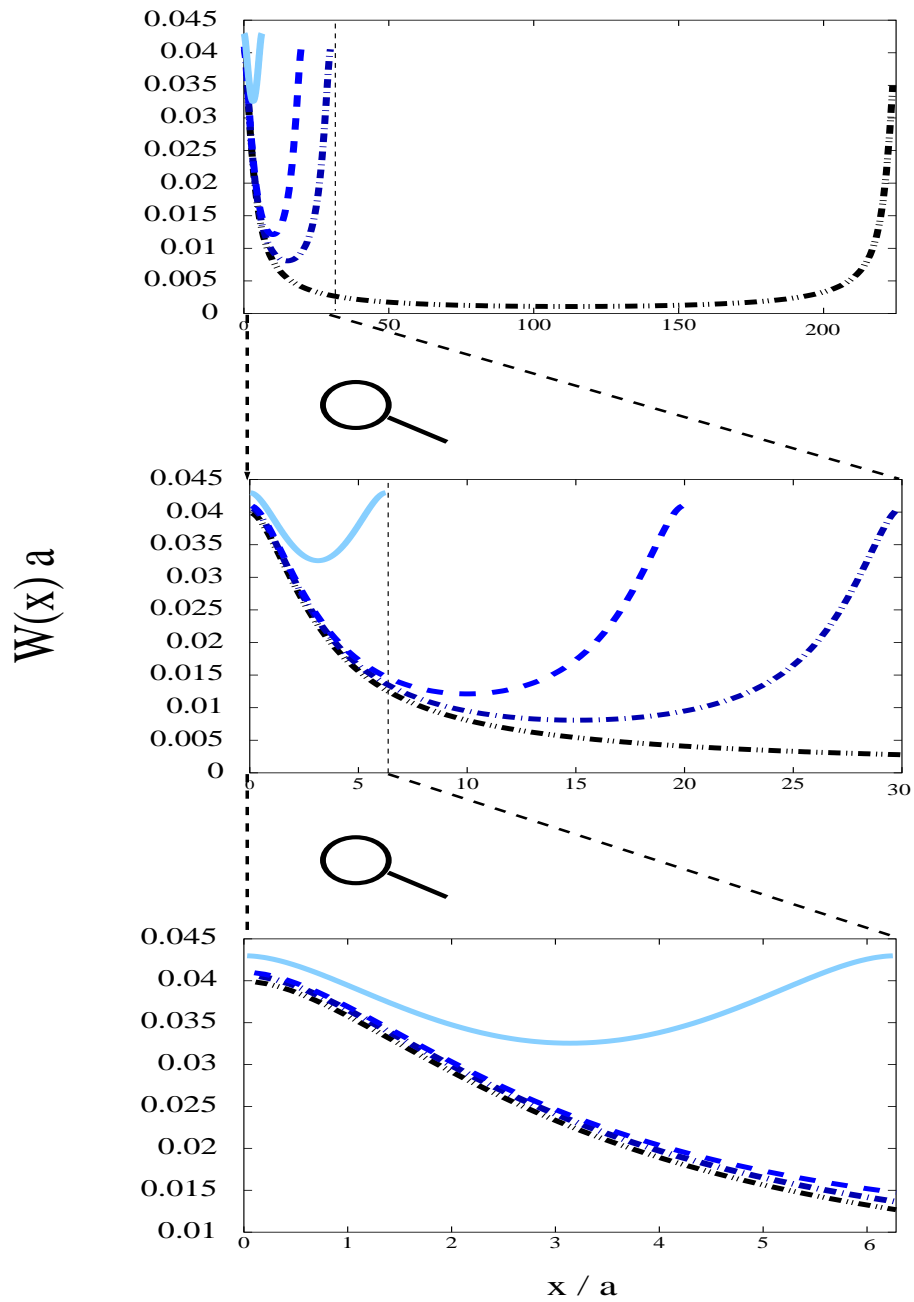


Abbildung 4.1: Vergleich des summierten effektiven Potentials (in Einheiten von $1/a$, willkürlicher Ursprung) für verschiedene Elektrogitterkonstanten R (in Einheiten von a): $R = 225$ Strich-Punkt-Punkt, $R = 30$ Strich-Punkt, $R = 20$ gestrichelt, $R = 6.28$ durchgezogene Linie

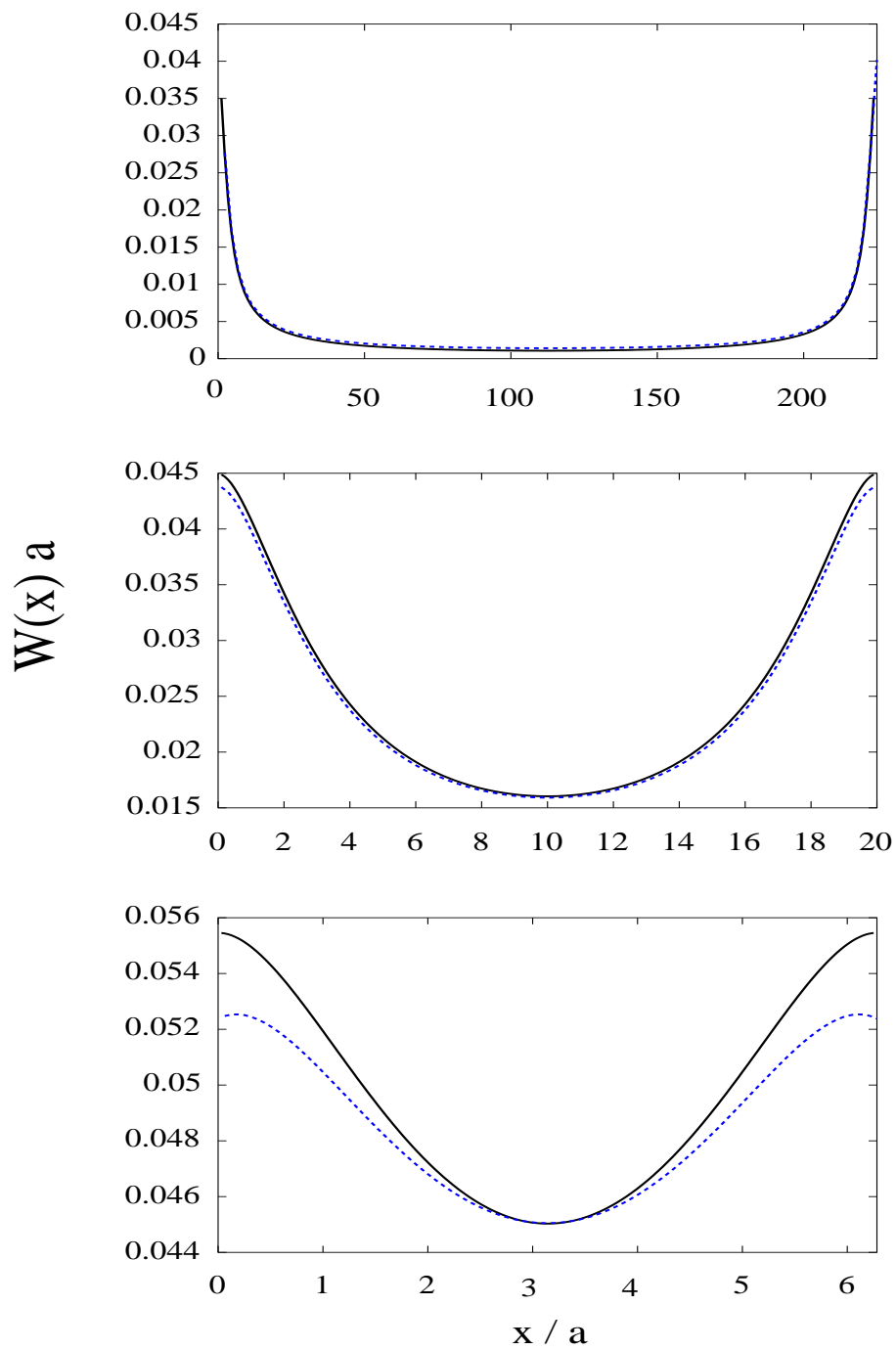


Abbildung 4.2: Vergleich des summierten effektiven Potenzials (in Einheiten von $1/a$; willkürlicher Ursprung) (durchgezogene Linie) mit einer Nächsten-Nachbar-Näherung (gestrichelte Linie): oben $R = 225$, Mitte $R = 20$, unten $R = 6.28$ (R in Einheiten von a)

4.4 Diffusives und ballistisches Regime

Es wurde bereits in der Herleitung betont, dass der besondere Charme des Modells darin liegt, dass es gelingt ein Vielteilchen-Problem exakt zu lösen. Damit ist natürlich sofort die Frage gestellt, inwiefern sich der Vielteilchen-Einfluss niederschlägt, d.h. welche Abweichungen vom Einteilchen-Modell [Ban93, Ban95] sich durch die Anwesenheit anderer Elektronen ausprägen. Dazu sollen zunächst Fälle betrachtet werden, in denen das elektrische Feld kollinear mit einer der Kristallachsen des Elektronengitters ist und von einer Anfangsgeschwindigkeit abgesehen wird. Neben einem gewissen Spielraum bei der Wahl des modifizierten Potenzials, der bereits angesprochen wurde, ist das Modell vollständig durch die Vorgabe zweier Parameter determiniert: der Stärke des elektrischen Feldes und der Größe der Kopplungskonstante zwischen Elektronen und Phononen. Je nach Wahl dieser zwei Parameter lassen sich innerhalb eines Einteilchen-Modells in der Asymptotik zwei charakteristische Regime unterscheiden: (i) dissipative Bewegung mit konstanter Geschwindigkeit und (ii) ballistische Bewegung mit einer konstanten Beschleunigung, die identisch ist mit der des nichtwechselwirkenden Elektrons im externen Feld. Für kleine Felder oder starke Kopplung befindet sich bildlich gesprochen das Quasiteilchen Polaron, das Elektron samt der es umgebenden Phonon-Wolke, im diffusiven Regime (asymptotisch lineare Evolution der Koordinate, konstante Geschwindigkeit, keine Beschleunigung). Diesem Einteilchen-Verhalten ist in Abbildung 4.3 die Vielteilchen-Evolution gegenübergestellt.

Die Klassifikation erfolgte hierbei über die Analyse des asymptotischen Verhaltens des Einteilchen-Modells [Ban93, Ban95], wenn im Weiteren auch für das Vielteilchen-Modell von dem einen oder anderen Regime gesprochen wird, so muss man sich vor Augen halten, dass aufgrund des periodischen, also nicht-verschwindenden Potenzials Aussagen über die Asymptotik nicht möglich sind, es sich nur um Analogiebezeichnungen handelt. Für den hier zunächst abgehandelten diffusiven Fall heisst das: Es wird sich aufgrund einer unendlichen Wiederholung von Streuereignissen keine asymptotische Bewegung mit konstanter Geschwindigkeit einstellen. Wie unter Berücksichtigung der bereits erörterten Kenntnisse über das summierte effektive Potenzial nicht anders zu erwarten, sind die Einteilchen- und die Vielteilchen-Evolution identisch, so lange das Elektron unter dem Einfluss seiner eigenen Phononwolke steht (im Bereich des dominanten Einflusses des im Ursprung lokalisierten Einteilchen-Potenzials). Erst wenn das Elektron in Bereiche vordringt, die bereits zuvor von anderen Elektronen populierte waren, treten die Abweichungen vom Einteilchen-Fall zu Tage. Um zu vermeiden, dass infolge des Gedächtniskernes die Rechenzeit aus dem Ruder zu groß wird,

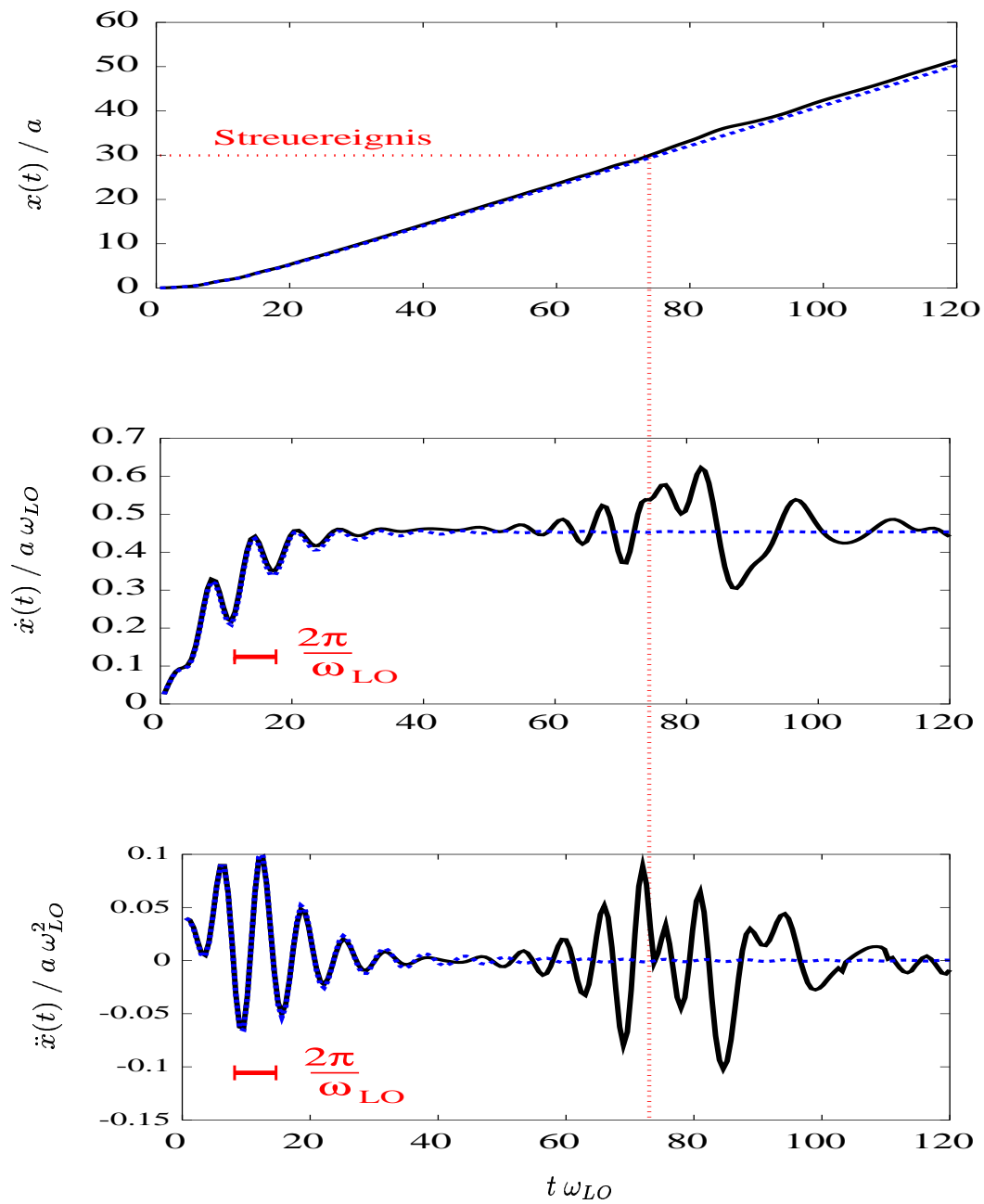


Abbildung 4.3: Diffusives Regime, freies Elektron (gepunktet), Einteilchen (gestrichelt), Vielteilchen (durchgezogen)

wurde hier ein Modellwert $R = 30$ gewählt, so dass Vielteilchen-Effekte auf einer vertretbaren Zeitskala zu beobachten sind. Das bedeutet, dass das Nachbarlektron also in einem Abstand $R = 30$ vom Ursprung zu finden ist. Im Graphen für die Koordinatenevolution wurde diese Marke mit „Streuereignis“ titulierte, die vertikale Linie verdeutlicht dann in der Evolution aller dargestellten Größen, wann dieses Streuereignis eintritt, so dass sein Einfluss in allen Größen sofort ins Auge springt: Während für die Koordinate der Effekt kaum sichtbar ist, zeigen sich in Geschwindigkeit und Beschleunigung deutliche Oszillationen um die Einteilchen-Evolution, und obwohl es sich um die Evolution der Elektronengrößen handelt, ist die Frequenz die der LO-Phononen. Das zuvor schon angesprochene asymptotische Verhalten der Einteilchen-Evolution behält im Vielteilchen-Fall seine Gültigkeit nur für die Mittelwerte.

Betrachtet man hingegen den Fall hoher elektrischer Felder, so ist folgendes Bild intuitiv: Hier ist die Phononwolke zu träge, um dem stark beschleunigten Elektron zu folgen, so dass dieses seiner Wolke entkommt und sich als „nacktes“ Elektron in einem ballistischen Regime befindet (Abb. 4.4). Für das Einteilchen-System ist dieser Prozess am evidentesten in der Beschleunigung. Sie nähert sich asymptotisch dem Grenzwert, der durch die Beschleunigung eines freien, nicht-wechselwirkenden Elektrons im konstanten elektrischen Feld gegeben ist. Da diese Befreiung von der Phononwolke nur asymptotisch vollständig gelingt, das Elektron sich also noch sehr lange unter dem partiellen Einfluss der Wolke befindet, liegt die Kurve der Geschwindigkeit immer unterhalb jener Grenzgeraden, die durch das freie Teilchen vorgegeben ist. Ebenso gut lässt sich dieser Sachverhalt energetisch erklären: Da einzig das elektrische Feld einen Energiezuwachs im System ermöglicht, ist die Situation eines freien Teilchens im Feld optimal (kein Energietransfer an das Phononfeld). Kommt es aufgrund der Wechselwirkung zu einem Energietransfer an die Phononen, so muss das für das Elektron bedeuten, dass ihm weniger als die maximal vom Feld zur Verfügung gestellte Energie bleibt. Liegt die Kurve also deshalb immer unterhalb der Kurve des freien Teilchens, so wird doch asymptotisch die gleiche Steigung erreicht. Es handelt sich um ein erst asymptotisch freies Elektron (wenn es sich unendlich weit von seiner Phononwolke entfernt hat). In diesem Regime sind die Vielteilchen-Effekte in Koordinate und Geschwindigkeit kaum sichtbar. Hier wurde der Übersichtlichkeit halber nur das erste Streuereignis markiert, obwohl aufgrund der beschleunigten Bewegung derer auf der dargestellten Zeitskala sehr viele sind. Die immer größer werdende Anzahl von Streuereignissen pro Zeiteinheit führt zu einer sehr verrauschten Evolution der Vielteilchen-Beschleunigungs-Variable. Wiederum folgt aber der zeitliche Mittelwert der Vielteilchen-Evolution der Asymptotik des Einteilchen-Falles.

Nachdem bisher die Unterschiede zwischen Einteilchen- und Vielteilchen-Modell in

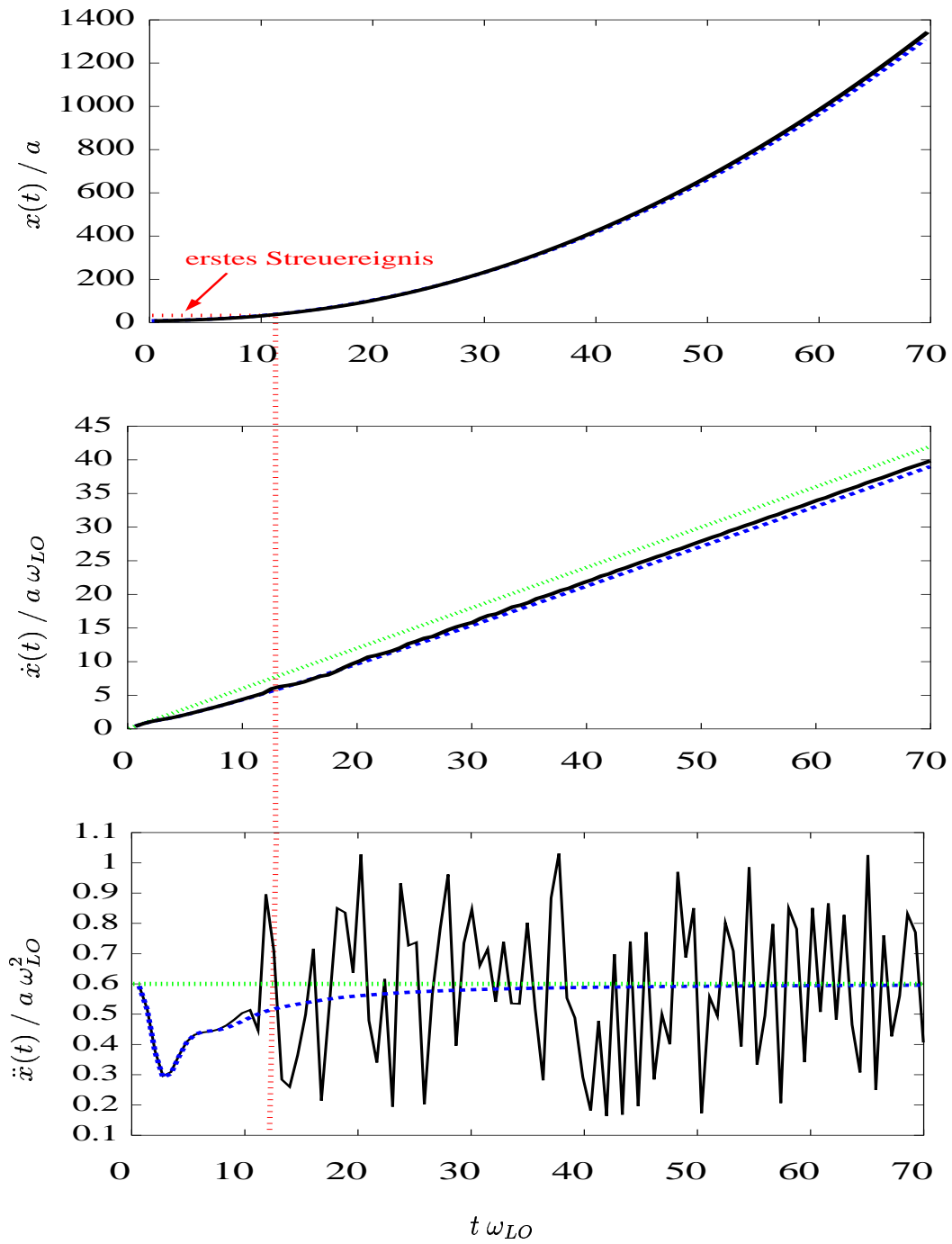


Abbildung 4.4: Ballistisches Regime, freies Elektron (gepunktet), Einteilchen (gestrichelt), Vielteilchen (durchgezogen)

den beiden Regimen herausgestellt wurden, zeigt nun Abbildung 4.5, dass im kritischen Bereich nahe des Überganges zwischen diffusivem und ballistischem Regime im Einteilchen-Fall die Elektronendichte ausschlaggebend sein kann, welcher der beiden Evolutionen das Vielteilchen-System unterworfen ist. Dabei handelt es sich um einen Kohärenzeffekt, abhängig davon in welcher momentanen Situation sich die Phononwolke befindet, wenn das Elektron auf sie trifft.

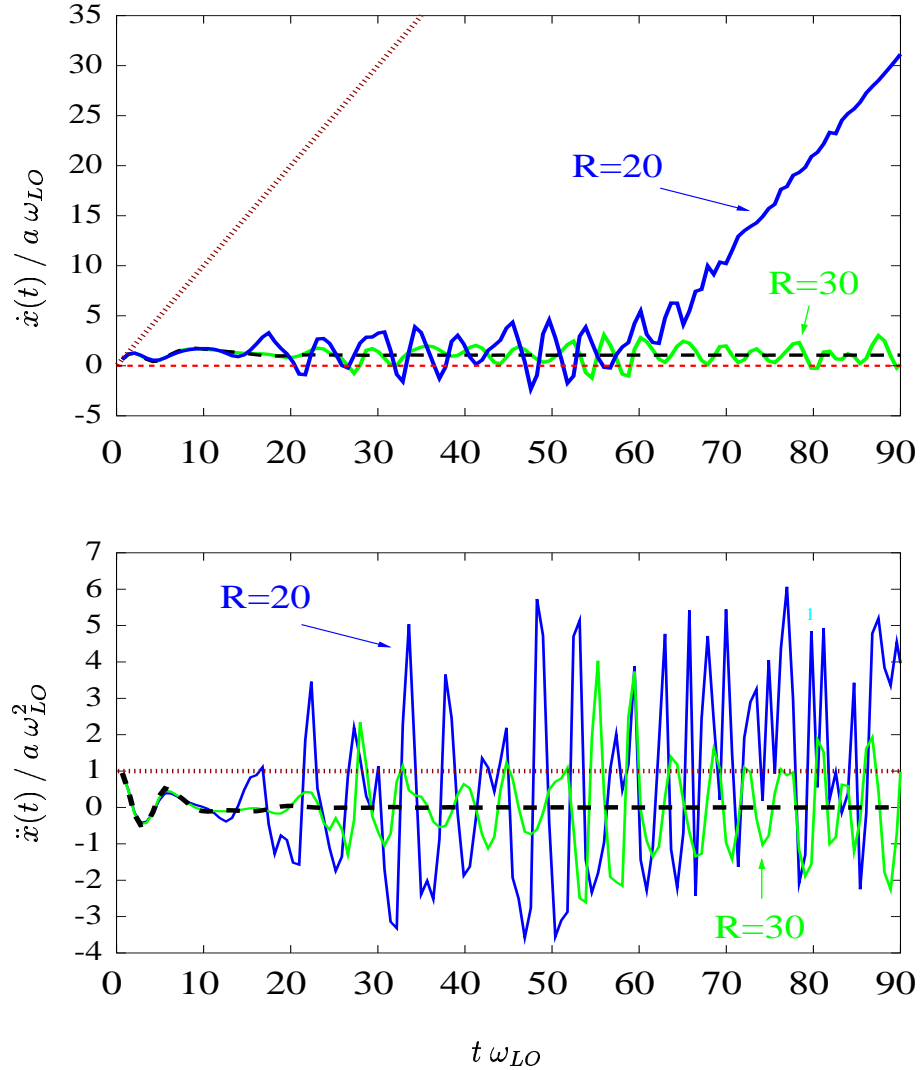


Abbildung 4.5: Kritischer Bereich, freies Elektron (gepunktet), Einteilchen (gestrichelt), Vielteilchen (durchgezogen)

4.5 Willkürliche Richtungen des elektrischen Feldes

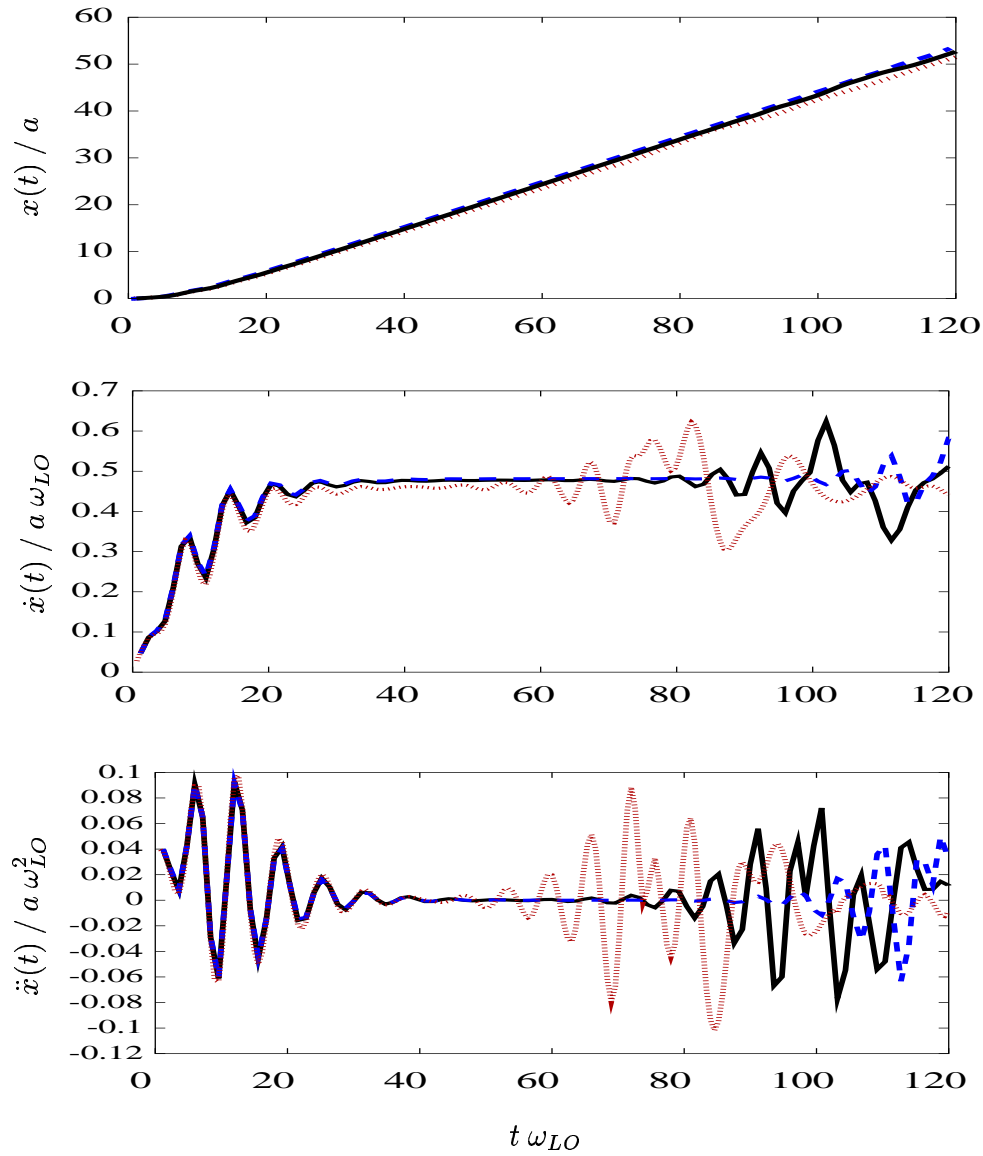


Abbildung 4.6: Verschiedene Ausrichtungen des elektrischen Feldes hinsichtlich des Elektronengitters, Bewegung entlang der Achse (gepunktet), nahe der Volumendiagonalen (gestrichelt), nahe der Oberflächendiagonalen (durchgezogen)

Um so klar wie möglich die Effekte herauszuarbeiten, die den Vielteilchen-Fall von der bescheideneren Variante nur eines Elektrons unterscheiden, wurde bisher die Feldrichtung entlang einer Achse des Elektrongitters gewählt. Dieser Fall ist jedoch im folgenden Sinne pathologisch: Durch die Ausrichtung des Feldes entlang der Elektronkristallachse wird das Elektron zwangsweise jedem Streuereignis - und zwar zentral - ausgesetzt. Wählt man hingegen die Richtung des elektrischen Feldes willkürlich, so ist durchaus der Fall möglich, dass nicht eine einzige Lokalisation zentral getroffen wird, sondern dass das Elektron näher oder ferner an allen vorbeifliegt. Es kommt nunmehr nicht nur zu Vorwärts- und Rückwärtsstreuungen, sondern zu Ablenkungen, d.h. zu Winkelstreuungen (Winkel zwischen der Richtung des elektrischen Feldes und den Elektrongrößen Koordinate, Geschwindigkeit und Beschleunigung). Von daher wird nun - falls nicht anders angegeben - übergegangen zur Darstellung radialer Größen. In Abbildung 4.6 werden die Evolutionen für die Fälle des elektrischen Feldes kollinear zu einer Elektronkristallachse, und nahe der Oberflächen- bzw. Volumendiagonalen verglichen. Die Richtungen sind so gewählt, dass zum einen Winkelstreuung möglich ist — also die Lokalisationen nicht nur zentral getroffen werden, zum anderen aber die Vielteilchen-Effekte ausgeprägt sind — das Elektron „streift“ eine Lokalisation im ersten Kubus.

Wiederum lassen sich in der Evolution der Koordinate kaum Unterschiede zwischen dem Ein- und dem Vielteilchen-Fall ausmachen, wohingegen in Geschwindigkeit und Beschleunigung das Verhalten auf einer kurzen Zeitskala identisch ist, es später aber unter dem Einfluss der anderen Elektronen zu starken Abweichungen kommt. Diese Abweichungen haben ihre Ursache darin, dass es abhängig von der Richtungen des elektrischen Feldes unterschiedlich lange dauert, bis das betrachtete Teilchen in die Nähe einer Lokalisation gelangt. Die Tatsache spiegelt das geometrische Artefakt wieder, dass sich aufgrund des kubischen Elektrongittermodells in der Fläche die nächste Lokalisation in einer Entfernung $\approx \sqrt{2}R$ befindet, während im Volumen die Entfernung $\approx \sqrt{3}R$ beträgt. Die folgende generelle Beobachtung jedoch behält ihre Gültigkeit bei allen gewählten Richtungen des elektrischen Feldes im Hinblick auf des Elektrongitter: Im diffusiven Bereich kommt es durch die Streuung zu Oszillationen im THz-Bereich, was besonders anschaulich ist in der Darstellung der Fourier-Transformation in Abbildung 4.7.

Ebenso deutlich bestätigt die Analyse, dass man sich, sobald die Streuzentren nicht zentral getroffen werden, einem echten dreidimensionalen Problem gegenüber sieht, es keineswegs nur zu Vorwärts- und Rückwärtsstreuung kommt. Sobald das betrachtete Elektron eine Lokalisation nicht zentral trifft, sondern nur streift, führt die Asymmetrie dazu, dass es zu einer Streuung im Winkel zwischen elektrischem Feld und

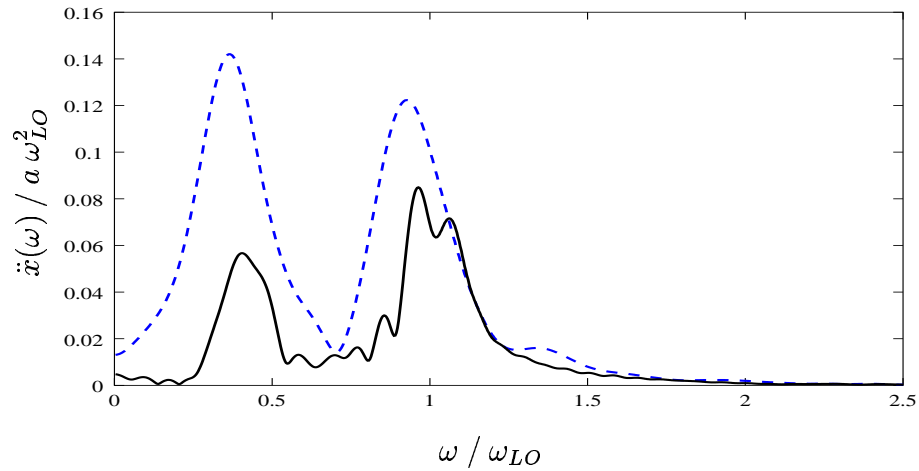


Abbildung 4.7: Fourier-Transformation der Beschleunigung, nahe der Oberflächendiagonalen (durchgezogen), nahe der Volumendiagonalen (gestrichelt)

Koordinatenevolution kommt, wie in Figur 4.8 verdeutlicht ist: Jedes Streuereignis resultiert in einer abrupten Änderung im Winkel gefolgt von einer mit Oszillationen überlagerten Neuausrichtung nach dem elektrischen Feld.

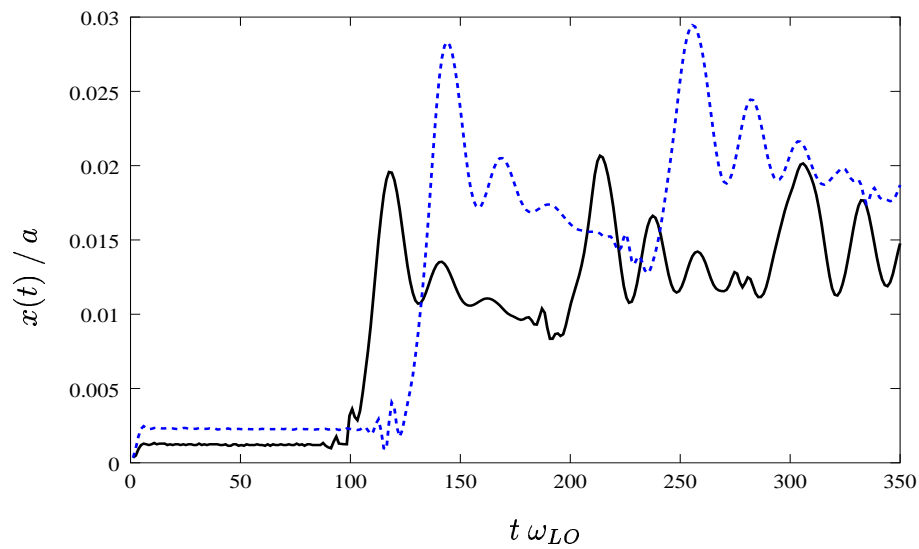


Abbildung 4.8: Streuung im Winkel zwischen elektrischem Feld und der Koordinate, nahe der Oberflächendiagonalen (durchgezogen), nahe der Volumendiagonalen (gestrichelt)

In diesem Abschnitt wurde der Einfluss der Richtung des elektrischen Feldes im Hinblick auf das Elektrogitter untersucht. Dies ist wichtig, um nicht etwaigen Künstlichkeiten des Modells aufzusitzen, schließlich handelte es sich ja bei der Anordnung der Elektronen auf einem Gitter um einen Kunstgriff, das System gekoppelter Differentialgleichungen zu lösen. Eine ausgewählte Orientierung des Elektrogitters ist nichts, was sich im Experiment realisieren ließe. Um zu einer mit experimentellen Befunden vergleichbaren Aussage zu kommen, wäre im Prinzip eine Ensemblemittelung nötig. Diese Mittelung ist insofern gedanklich vollzogen, als verschiedene Richtungen untersucht und die Gemeinsamkeiten in den Ergebnissen aufgezeigt wurden: Unabhängig von der Orientierung des Elektrogitters zur elektrischen Feldrichtung kommt es zu Oszillationen im THz-Bereich.

4.6 Gallium-Arsenid-Parameter

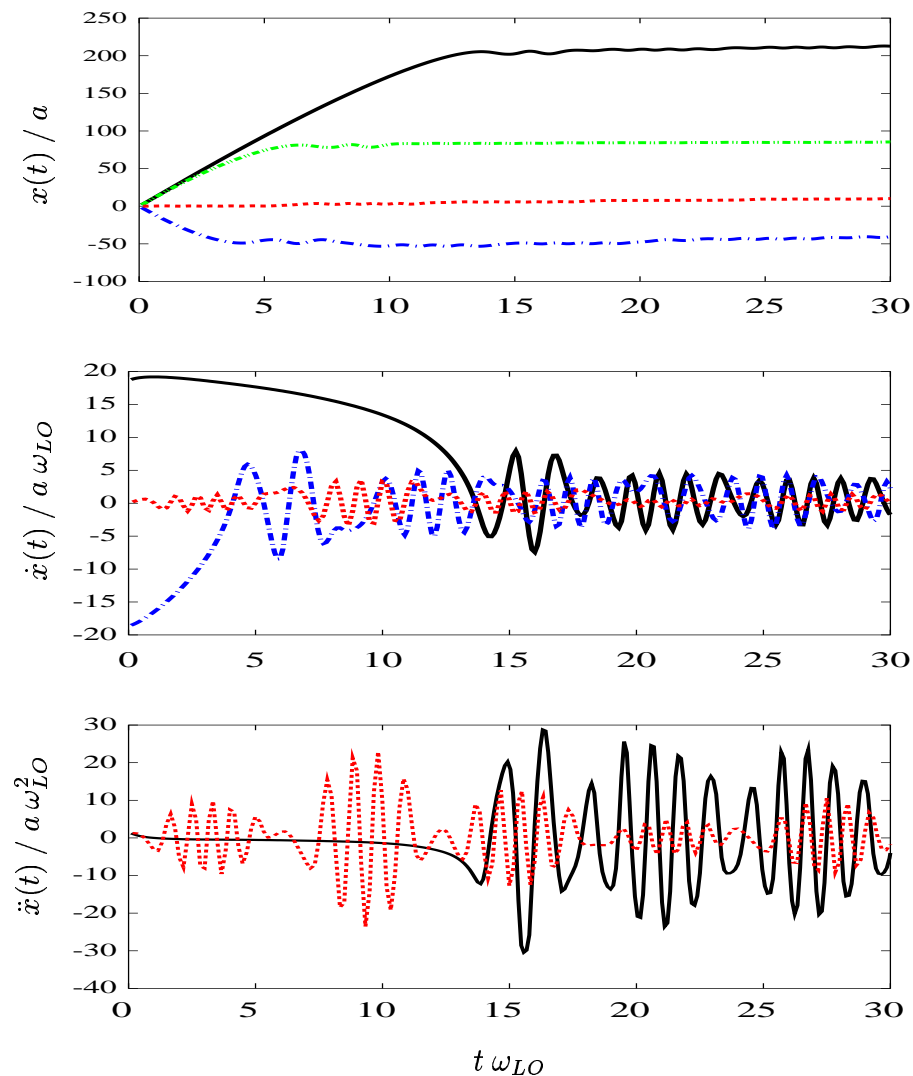


Abbildung 4.9: Verschiedene Richtungen der Anfangsgeschwindigkeiten, In-Feld-Richtung (durchgezogen), keine Anfangsgeschwindigkeit (gestrichelt), Gegen-Feld-Richtung (Strich-Punkt), senkrecht zum Feld (Strich-Punkt-Punkt)

Um die Übersichtlichkeit nicht zu beeinträchtigen, wurden bisher keine Anfangsgeschwindigkeiten berücksichtigt. Will man jedoch die experimentellen Parameter simulieren, so muss man der Tatsache Rechnung tragen, dass der anregende Laser nicht exakt auf die Bandlücke abgestimmt war, sondern die Anregung im Band stattfand.

In unserem klassischen Modell tun wir dies, indem wir die Verstimmung als initiale kinetische Energie in eine Anfangsgeschwindigkeit übersetzen. Damit ist zumindest ein Anhaltspunkt für den Absolutwert der Anfangsgeschwindigkeit gesetzt, wenn auch der energetischen Unschärfe aufgrund der Kürze der Laseranregung dadurch natürlich nicht beizukommen ist. Über die Richtung der Anfangsgeschwindigkeit gibt die Verstimmung allerdings keinen Aufschluss, so dass hier eine Mittelung über alle Richtungen notwendig scheint. Anstatt aber diese Mittelung tatsächlich numerisch auszuführen, beschränken wir uns hier darauf, diese Mittelung gedanklich zu vollziehen, indem wir aus exemplarischen Richtungen Gemeinsamkeiten extrahieren. In Abbildung 4.9 sind einige Evolutionen charakteristischer Anfangsbedingungen dargestellt: Anfangsgeschwindigkeit in Feldrichtung, gegen die Feldrichtung, senkrecht zum Feld und keine Anfangsgeschwindigkeit. Angemerkt sei, dass hierbei die Oszillationen der Elektronen im diffusiven Regime und somit ihre Abstrahlung im Fokus stand, mit Bedacht wurde das elektrische Feld daher so schwach gewählt, dass für alle Anfangsgeschwindigkeiten die Evolutionen diffusiv waren; der aus früheren Arbeiten [Ban93, Ban95] schon bekannte Einfluss der Anfangsgeschwindigkeit auf den letztendlichen Charakter der Evolution war nicht Gegenstand der Untersuchung. Wie nicht anders zu erwarten und der Name schon sagt, beherrschen die unterschiedlichen Anfangsgeschwindigkeiten das anfängliche Verhalten des Elektrons, nichtsdestoweniger ist allen das gleiche Langzeitverhalten gemein. In der Evolution der Koordinate haben nach etwa $t = 15$ alle die asymptotisch erwartete Steigung (in dieser Darstellung sehr klein). In den Darstellungen der Geschwindigkeit und Beschleunigung zeigen alle Oszillationen im gleichen THz-Frequenzbereich, was wiederum die Fourier-Transformation (Beschleunigung) in Figur 4.10 belegt.

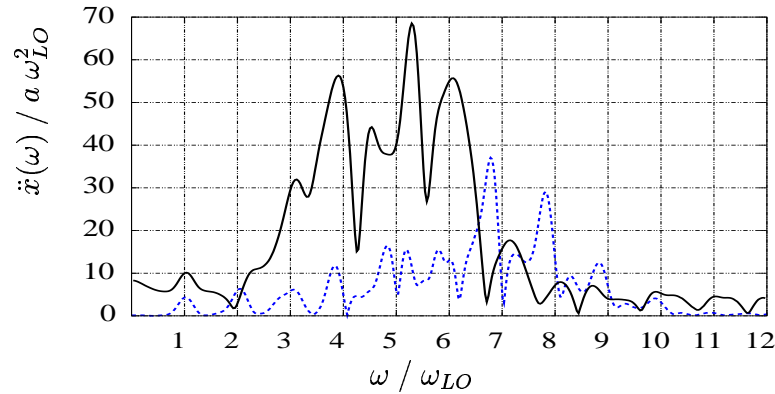


Abbildung 4.10: Fourier-transformiertes Signal (Beschleunigung); Anfangsgeschwindigkeit in Feldrichtung (durchgezogen); keine Anfangsgeschwindigkeit (gestrichelt)

4.7 Die phononische Dielektrizitätsfunktion

In den Experimenten [Lei99, Lei00] wurde das zeitliche THz-Signal gemessen. Der phononische Anteil des Signals wurde durch die dielektrische Funktion eines Oszillatormodells simuliert [Jac]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} . \quad (4.24)$$

Das ursprüngliche Signal wurde um diesen Anteil bereinigt, um den elektronischen Anteil zu isolieren:

$$\vec{E}_{tot}(\omega)\epsilon(\omega) = \vec{E}_e . \quad (4.25)$$

Dem elektronischen Anteil galt auch die Beschäftigung der bisherigen Abschnitte dieses Kapitels. Hier soll die Frage beantwortet werden, wie im phononischen Anteil die Oszillation mit der LO-Phononfrequenz zustande kommt. Denn im Unterschied zum ursprünglichen Signal war im elektronischen Anteil im Experiment die Oszillation mit der LO-Phononfrequenz unterdrückt bzw. die LO-Phononresonanz im Spektrum ausgeblendet, d.h. die Oszillation war auf den phononischen Anteil zurückzuführen. Die charakteristische Frequenz verleitet dazu, das Signal den longitudinalen Phononen zuzuschreiben; dies ist jedoch falsch, da longitudinale Phononen *per definitionem* nicht zur transversalen Abstrahlung beitragen. Die Betrachtung gilt daher den Gleichungen der transversalen Moden. Zum einen ist dies der transversale Anteil der Oszillatorgleichung für die Phononen:

$$(\omega_{TO}^2 - \omega^2)\vec{u}_T = \frac{e}{M}\vec{E}_T \quad (4.26)$$

Man beachte, dass es hier zu keiner Renormierung der Frequenz durch die Phonon-Phonon-Wechselwirkung kommt (siehe Abschn. 4.1 Gl. 4.7), da die Kopplung longitudinal ist. Suggestiv wurde ω_0 durch ω_{TO} ersetzt. Zum anderen ist dies der transversale Anteil der Maxwell-Gleichung:

$$(k^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_\infty)\vec{E}_T = \frac{4\pi}{c^2}i\omega\vec{j}_T + \frac{4\pi}{c^2}i\omega\vec{j}_T^{ext} . \quad (4.27)$$

Substituiert man den inneren Strom \vec{j} durch die Polarisation \vec{P} und weiter durch das Verschiebungsfeld \vec{u} :

$$\vec{j}_T = -i\omega\vec{P}_T = -i\omega\frac{e}{v}\vec{u}_T , \quad (4.28)$$

so entsteht ein gekoppeltes Gleichungssystem in \vec{E}_T und \vec{u}_T :

$$(\omega_{TO}^2 - \omega^2)\vec{u}_T = \frac{e}{M}\vec{E}_T \quad (4.29)$$

$$\left(k^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_\infty\right)\vec{E}_T = \frac{4\pi}{c^2}i\omega\left(-i\omega\frac{e}{v}\vec{u}_T\right) + \frac{4\pi}{c^2}i\omega\vec{j}_T^{ext} . \quad (4.30)$$

Die Eigenmoden ergeben sich allgemein aus dem homogenen Gleichungssystem ($\vec{j}_T^{ext} = 0$), wenn man die Determinantengleichung löst. Konkret hat sie hier mit $\omega_{LO}^2 \equiv \omega_{TO}^2 + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty M v}$ die Form:

$$\omega^4 - \omega^2\left(\omega_{LO}^2 + \frac{k^2 c^2}{\epsilon_\infty}\right) + \omega_{TO}^2 \frac{k^2 c^2}{\epsilon_\infty} = 0 \quad . \quad (4.31)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist schematisch in Abbildung 4.11 zu sehen.

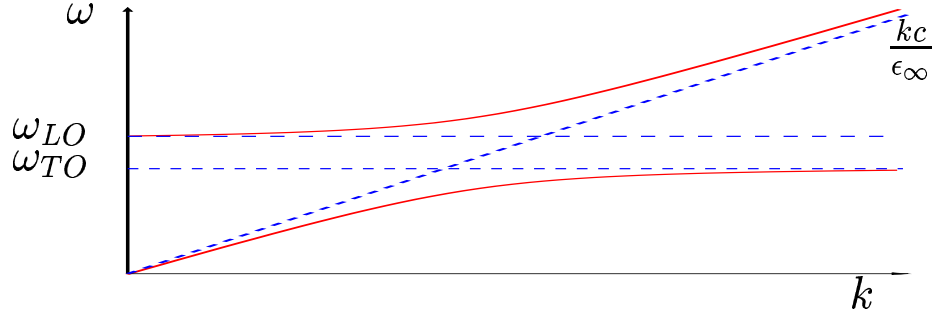


Abbildung 4.11: Polariton-Spektrum (schematisch)

Durch die Kopplung der Polarisation mit dem Photon entsteht das Phonon-Polariton, das Spektrum dieser neuen Eigenmoden zeigt das typische Verhalten der Vermeidung um den Punkt, wo sich die ursprünglichen Moden des Lichts und der Polarisation geschnitten hätten (anticrossing) [Mah]. Dieser Vermeidungs-Effekt ist es, der — obwohl es sich weiterhin um transversale Moden handelt — für kleine k -Werte das Spektrum auf die LO-Phonon-Frequenz verschiebt.

Abschließend lässt sich das Szenario damit so zusammenfassen: Ein optischer Puls erzeugt Elektronen und Löcher, diese werden durch das elektrische Feld beschleunigt, treten in starke Wechselwirkung mit den LO-Phononen, so dass diese die Bewegung der Elektronen sichtbar beeinflussen. Aus dem Zusammenspiel von elektrischem Feld und Phononen entsteht der elektronische Anteil des Signals. In bescheidenerem Maße führt die Abschirmung des elektrischen Feldes durch die Ladungstrennung von Elektronen und Löchern auch zur Anregung transversaler Moden; deren Einfluss auf die Ladungsträger ist zwar vernachlässigbar gering, da aber ausschließlich sie abstrahlen, stellen sie den gesamten phononischen Anteil des Signals. Auf die Kopplung mit dem Lichtfeld ist es zurückzuführen, dass dabei die LO-Phononfrequenz zu beobachten ist.

Kapitel 5

Valenzbandstruktur eines GaAs-Übergitters

Das am häufigsten diskutierte System im Zusammenhang mit der Erzeugung von THz-Strahlung ist eine periodische Potenzialstruktur, in deren Richtung zusätzlich ein konstantes elektrisches Feld angelegt ist. Je nach Perspektive entfachte sich die Auseinandersetzung um den Begriff der „Bloch-Oszillationen“ bzw. der „Wannier-Stark-Leiter“. An dieser Stelle ist die Entwicklung nur relativ knapp skizziert, und für die Details auf die bereits grosse Fülle von neueren Übersichtsartikeln verwiesen [Nen, Ros94, Agu, Mei98, kLeo98, Ross98, Lys99].

Mit Hilfe des blochschen „Beschleunigungstheorems“ [Blo] wies Zener [Zen] auf die Möglichkeit hin, dass Elektronen unter Einfluss eines konstanten elektrischen Feldes in einer periodischen Potenzialstruktur oszillieren. Auf Kane [Kan59] und Wannier [Wan60, Wan62] geht die Erkenntnis zurück, dass in einem solchen System das Spektrum durch die äquidistante „Wannier-Stark-Leiter“ charakterisiert ist. Der lange Disput darüber, ob und inwiefern dieses Bild tatsächlich zutreffend ist [Hou, Kan59, Arg, Kit, Zak, Kri, Nen] hatte sein Ursache nicht zuletzt darin, dass im natürlichen Kristallgitter von Volumenmaterialien kaum eine Chance bestand — und besteht — Bloch-Oszillationen zu beobachten. Insofern darf die Arbeit von Esaki und Tsu [Esa] in gleich zweierlei Hinsicht als bahnbrechend gelten: Erstens machte der Vorschlag, die blochsche Theorie auf Heterostrukturen in Form von Übergittern anzuwenden, Bloch-Oszillationen zu ersten Mal — wenn auch noch für einige Jahre nur prinzipiell — experimenteller Untersuchung zugänglich [Ash]; und zweitens verschob die andere Periodenlänge die zu erwartende elektromagnetische Strahlung in den THz-Bereich. In das Ende der achtziger und den Anfang der neunziger Jahre fielen die experimentellen Bestätigungen: Die Wannier-Stark-Leiter wur-

de in Photostrom- und Photolumineszenz-Spektren beobachtet [Ble, Men], Bloch-Oszillationen in entarteten Vier-Wellen-Misch-Signalen [Fel, kLeo92] und durch THz-Spektroskopie [Wasch93, Wasch94/1, Wasch94/2, Leisch] nachgewiesen.

Als Blick über den Tellerrand möge der Hinweis dienen, dass man Bloch-Oszillationen auch von Cäsium-Atomen beobachtet hat. Die periodische Potenzialstruktur ist dabei durch eine stehende optische Welle induziert. Die resultierenden Frequenzen lagen im Bereich zwischen 60 und 1900 Hz [Dah].

Nachdem somit der prinzipielle Streit zugunsten der Bloch-Oszillationen entschieden war, diversifizierte sich das Feld: exzitonische Einflüsse [Dev, Dig90, Dig94, Lin95], Streumechanismen durch Phononen [vPle94, Ross95, Had] und Elektron-Elektron-Wechselwirkung [Ross96], Zener-Tunneln [Glu99, Glu00], ein zusätzliches Magnetfeld [Dev, Hum99, Hum01, Bau], „atmende“ Moden (breathing modes) [Dig94, Sud, Lys99] und räumliche Verschiebung [Lys97, Lys99], der Übergang vom Franz-Keldysh-Effekt zur Wannier-Stark-Quantisierung [khSchm, Lin95], all dies sind Stichworte neuerer Entwicklungen, auf die an dieser Stelle nicht weiter eingegangen werden soll.

In diesen Kontext ist der folgende Teil der Arbeit gedanklich und konzeptionell eingebettet, wenn auch die Berechnungen nicht spezifisch für das Bloch-Problem im elektrischen Feld sind, sondern ausschliesslich auf den Valenzbandcharakter und das Übergitter Bezug nehmen.

Der allgemeine Sprachgebrauch in Sachen Bloch-Oszillationen erwähnt die Löcher meist nur am Rande. Natürlich werden sie durch den Laserpuls in gleichem Masse wie die Leitungselektronen erzeugt, sie tragen aber kaum zum THz-Signal bei, so die Aussage. Die Begründung nimmt dabei im einen wie im anderen Bild Zuflucht bei der grossen Masse der schweren Löcher; es wird auf Konzepte zurückgegriffen, wie sie für Volumenhalbleiter Gültigkeit haben. Die Beschreibung durch schwere und leichte Löcher ist jedoch — wie schon in 2.1 angedeutet — nicht ohne weiteres auf Heterostrukturen übertragbar. Hier liegt der Fall aufgrund der Anisotropie komplizierter. Valenzbandstrukturechnungen für den Einzel-Quantentopf wurden zunächst für den unendlichen Topf [Ned] und später für den endlichen Topf [Alt83/1, Alt83/2, Alt85, Alt86, And, Mat] im Rahmen des von Luttinger vorgeschlagen Matrix-Hamilton-Operators angestellt. Einige der Ergebnisse sind zwar auch für Übergitter mit sehr dicken Barrieren übertragbar, für echte Übergitter liegen jedoch — im Gegensatz zu den Mehrfach-Quantentöpfe (multiple quantum wells) — bisher nur Daten innerhalb der kp -Theorie vor [Ger].

In diesem Teil der Arbeit wird die dreidimensionale Dispersion der ersten Loch-Minibänder unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung in einem sphärischen Luttinger-Modell für ein Übergitter berechnet. Allerdings nähern wir uns dem Pro-

blem aus dem Zusammenhang der Bloch-Oszillationen, deren Hauptbefunde wir in Abschnitt 5.1 illustrieren. In Abschnitt 5.2 zeigt das quantenmechanische Modell der Halbleiter-Bloch-Gleichungen, wo eine verbesserte Valenzbandstruktur in die Berechnungen eingeht. Als Anwendung wird ähnlich dem Fall in Kapitel 3 in Abschnitt 3.7 der Einfluss der Anregungsbedingungen illustriert, dabei werden wir noch einmal auf die atmenden Moden zu sprechen kommen. Abschnitt 5.3 stellt das wohlbekannte, eindimensionale Kronig-Penney-Modell vor, wertet es für die hier angegebenen Parameter aus und interpretiert es zwischen den Grenzfällen freier Teilchen und des isolierten Quantentopfes. Diese Daten sind relevant für die Deutung des elektronischen Anteils [Hum99]. Dem Luttinger-Modell für die Valenzbänder in Kombination mit den Ideen des Kronig-Penney-Modells ist 5.4 reserviert. Der Valenzbandentartung wird durch die Matrixform des Luttinger-Hamilton-Operators Rechnung getragen. Die Anisotropie aufgrund des Supergitters führt in diesem Formalismus zu einer Verquickung der Übergitter- und der Schichtrichtungen. Die Gleichungen des vektoriellen Kronig-Penney-Modells werden formuliert und aufbereitet, so dass sich Abschnitt 5.5 ihre numerischen Auswertung und eine abrundende Interpretation anschließen kann.

Die numerischen Berechnungen wurden für ein typisches [Wasch94/1, Ros94, Hum99, Hum01, Mei00] GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs-Übergitter mit dem Legierungskoeffizienten $x=0.3$ durchgeführt. Der Unterschied der Bandlücken zwischen dem GaAs-Topf und der Ga_{1-x}Al_xAs-Barriere variiert mit dem Aluminium-Anteil nach $\Delta E_g(x) = 1247x$ meV und ist zu 60% auf die Leitungsbandstruktur anzurechnen, wohingegen 40% auf das Valenzband entfallen [Bast88, Ont]. Daraus errechnen sich die Barrierenhöhen zu $V_0 = 224$ meV bzw. $V_0 = 141$ meV. Die Breite des GaAs-Topfes beträgt $a = 9.7$ nm und die der GaAlAs-Barriere $b = 1.7$ nm, so dass daraus die Periodenlänge $l = 11.4$ nm resultiert.

Der Inhalt dieses Kapitels geht auf [Mein99] zurück.

5.1 Bloch-Elektronen im elektrischen Feld

Ohne Anspruch auf mathematische Rigorosität entwerfen wir hier zunächst die Grundgedanken der Bloch-Oszillationen in einem Band.

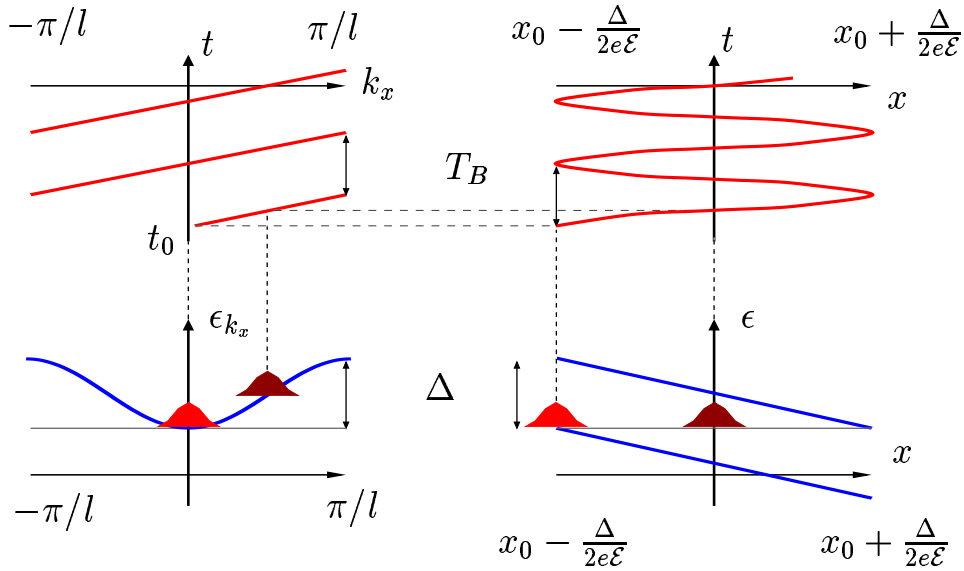


Abbildung 5.1: Bloch-Oszillationen. Dynamik eines zur Zeit t_0 an der unteren Bandkante erzeugten Wellenpaketes. Bewegung des Wellenpaketes im k -Raum entlang der Dispersionskurve (Gl. 5.3, unten links); im Ortsraum innerhalb der Lokalisierungslänge (Gl. 5.7, unten rechts); lineare zeitliche Evolution des Schwerpunktes des Wellenpaketes in der Brillouin-Zone (Gl. 5.2, oben links); Oszillation des Wellenpaketschwerpunktes im Ortsraum (Gl. 5.6, oben rechts); siehe [Mei00]

Da sich die Formulierung auf die eine Dimension der Übergitterrichtung beschränkt, wird von einer vektoriellen Notation abgesehen. Aus dem Beschleunigungstheorem

$$\hbar \frac{dk}{dt} = e\mathcal{E} \quad (5.1)$$

ergibt sich für ein konstantes elektrisches Feld sofort

$$k(t) = k_0 + \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} t \quad (5.2)$$

Jedes periodische Potential bedingt Energiebänder. Die Nächste-Nachbar-Näherung stark gebundener Elektronen ergibt mit der Periode l und der Bandbreite Δ eine

harmonische Dispersion

$$\epsilon(k) = \frac{\Delta}{2} (1 - \cos(kl)) \quad . \quad (5.3)$$

Der Geschwindigkeit eines Wellenpaketes hat dann die Form

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial k} = \frac{\Delta l}{2\hbar} \sin(kl) \quad . \quad (5.4)$$

Damit ist sofort offensichtlich, dass das Wellenpaket mit der Bloch-Frequenz

$$\omega_{BO} = \frac{e\mathcal{E}l}{\hbar} \quad (5.5)$$

oszilliert:

$$x(t) = x_0 - \frac{\Delta}{2e\mathcal{E}} \cos(\omega_{BO}t) \quad . \quad (5.6)$$

Durch

$$L = \frac{\Delta}{e\mathcal{E}} \quad (5.7)$$

ist die vom Feld erzwungene räumliche Lokalisierung der oszillatorischen Bewegung im Ortsraum gegeben. Aus der Näherung freier Elektronen zur Berechnung der Bandstruktur sei die Erkenntnis entlehnt, dass größere Teilchenmassen zu schmalen Bändern führen. Das Bild der Verklappung der Frei-Teilchen-Parabel in die erste Brillouin-Zone, sowie anschließende entartete Störungstheorie macht die Aussage sofort plausibel. Bereits vorweggenommen sei (siehe Gl. 5.13 bis 5.16), dass das Spektrum durch die äquidistante Wannier-Stark-Leiter charakterisiert ist:

$$\epsilon = \epsilon_0 + me\mathcal{E}d \quad , \quad (5.8)$$

wobei es sich bei ϵ_0 um einen Referenzwert handelt und m aus der Menge der ganzen Zahl ist.

Dazu einige Bemerkungen:

Die bisherigen Argumentation zeichnete sich insofern durch Skalierbarkeit aus, als sie sowohl für ein Kristallgitter, als auch für ein Übergitter, ja sogar für das optische Gitter einer stehenden Welle [Dah] anwendbar ist.

Für die Übergitter ist der Gedankengang der folgende: Für Anregungen nahe der Bandkante ist die Effektive-Massen-Näherung gut gerechtfertigt, so dass sich das zugrunde liegende Kristallgitter lediglich in einer Modifikation der Massen für die ansonsten „freien“ Teilchen niederschlägt. Für die Heterostruktur eines Übergitters bedeutet dies im Rahmen der Einhüllenden-Näherung die Ausbildung von Minibändern für die „freien“ Teilchen. Die Minibänder werden nun anders als die ursprünglichen Bänder vollständig mitgenommen. Sie sind einerseits energetisch soweit von einander

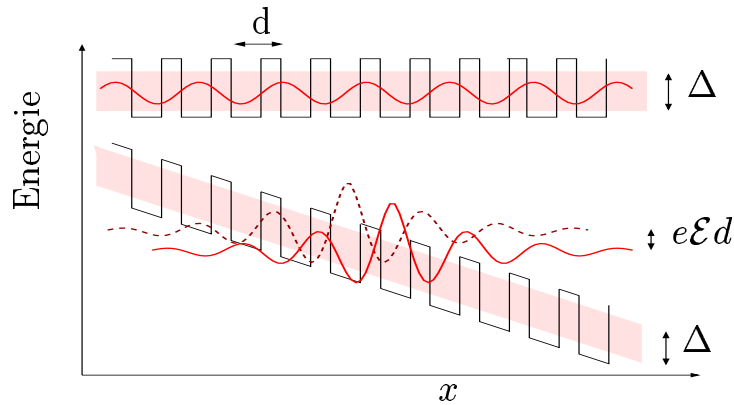


Abbildung 5.2: Bandstruktur ohne elektrisches Feld: ausgedehnte Bloch-Funktionen; durch das elektrische Feld verkippte Bandstruktur: diskrete lokalisierte Zustände (schematisch)

getrennt, das ein die Kohärenz zerstörendes Tunneln unwahrscheinlich ist [Glu99], andererseits schmal genug, dass das elektrische Feld die Elektronen kohärent (im Sinne eines Wellenpaketes) über mehrere Zyklen umhertreiben kann, bevor die Wahrscheinlichkeit von Streuprozessen überhand nimmt.

An der Bloch-Frequenz ist sofort nachvollziehbar, wo Esaki und Tsue [Esa] den Übergitterhebel ansetzten: Die im Vergleich zu natürlichen Kristallen etwa hundertmal größere Übergitterkonstante l führt zu den viel schnelleren Oszillationen, zu Frequenzen im THz-Bereich. Darüberhinaus lässt sich die Gitterkonstante einer Heterostruktur gewissermaßen am Reissbrett bestimmen (miniband engineering).

In der Einhüllenden-Näherung bei der Betrachtung von Übergittern kann es sich bei den Teilchen auch um Löcher handeln. Stillschweigend geht man hier zu einem Zweiband-Modell über bei dem Elektronen und Löcher vorhanden sind. Auf die Anregung wird hingegen erst in Abschnitt 5.2 genauer eingegangen. Konkreter muss hier jetzt also von Minibändern gesprochen werden. Nimmt man es also als gegeben, dass es sich bei den Löchern um schwere Löcher handelt (siehe Abschn. 2, 5), so hat die größere Masse kleinere Minibandbreiten zur Folge. Konsequenz daraus ist die kleinere Amplitude der Geschwindigkeitsoszillationen, was sich unmittelbar in einem nur geringen Beitrag zum Strom und damit zur Abstrahlung niederschlägt.

Effekt des elektrischen Feldes ist eine Lokalisierung der ehemals unendlich ausgedehnten Bloch-Funktionen, diese Lokalisierung ist umso stärker, je größer die Masse.

Damit lassen sich die THz-Oszillationen auch im Wannier-Stark-Bild sehr anschaulich begründen, indem wir mit dem Drei-Niveau-Modell argumentieren: Durch die

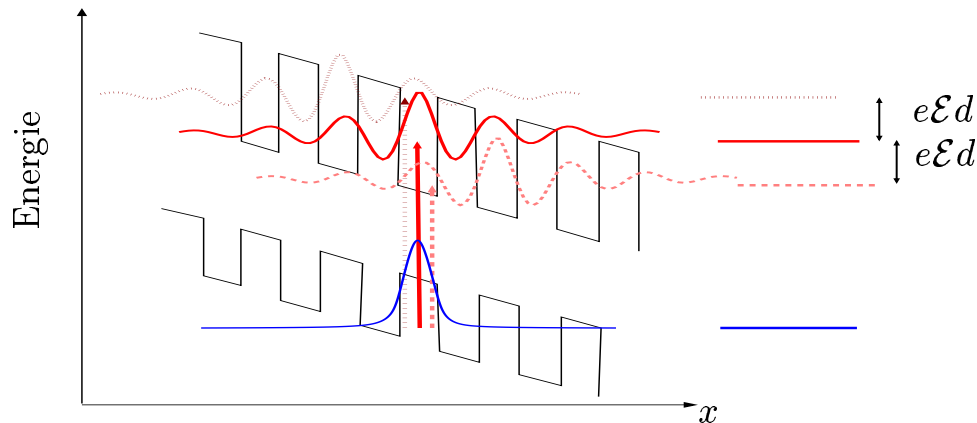


Abbildung 5.3: Bloch-Oszillationen im Wannier-Stark-Bild, analog zum Drei-Niveau-System

starke Lokalisierung der Löcher hat man es nur mit einem Loch-Niveau zu tun, bei den Leitungselektronen sind die Zustände ausgedehnter, der optische Puls kann eine Überlagerung von Zuständen anregen, die sich um das Energieniveau einer Wannier-Stark-Sprosse $e\mathcal{E}l$ unterscheiden, es kommt zu einer Oszillation des nichtstationären Leitungselektron-Zustandes bezüglich des stark lokalisierten Loch-Zustandes. Das somit zeitlich veränderliche Dipolmoment strahlt.

Betrachtet man Elektronen in einem periodischen Potential, so sind die Wellenfunktionen durch die Bloch-Funktionen gegeben, indiziert mit der Quantenzahl des Bandes n und der des Kristallimpulses k

$$\psi_{n,k} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} u_{n,k}(x) \quad , \quad (5.9)$$

wobei $u_{n,k}(x)$ eine periodische Funktion ist. Legt man zusätzlich ein elektrisches Feld an, so ist der Hamilton-Operator um den Term

$$H_{\mathcal{E}} = -e\mathcal{E}x \quad (5.10)$$

reicher. Bei den daraus resultierenden Matrixelementen lassen sich drei Anteile differenzieren:

$$\begin{aligned} \langle n, k | x | n', k' \rangle &= X_{n,n} \delta_{n,n'} \delta_{k,k'} \\ &+ X_{n,n'} \delta_{k,k'} \\ &+ \delta_{n,n'} \delta_{k,k'} i \frac{\partial}{\partial k} \end{aligned} \quad (5.11)$$

mit

$$X_{n,n'} = i \int_l dx u_{n,k}^*(x) \frac{\partial}{\partial k} u_{n',k}(x) \quad . \quad (5.12)$$

Der erste Term ist diagonal in k und n , es handelt sich um eine Energiekorrektur, der zweite Term ist diagonal in k , die Bandindizes sind hingegen verschieden, er vermittelt die Übergänge zwischen den Bändern. Zum prinzipiellen Verständnis der Bloch-Oszillationen können beide Terme vernachlässigt werden. Term 2 wird im Anhang als für das Zener-Tunneln verantwortlich diskutiert.

Der dritte Term ist dagegen in den Bandindizes diagonal, er treibt die Teilchen durch den k -Raum. Mit seiner Hilfe wird im Rahmen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung das Beschleunigungstheorem 5.1 bewiesen [Cal].

Die stationäre Schrödinger-Gleichung führt auf das Spektrum. In einer Einband-

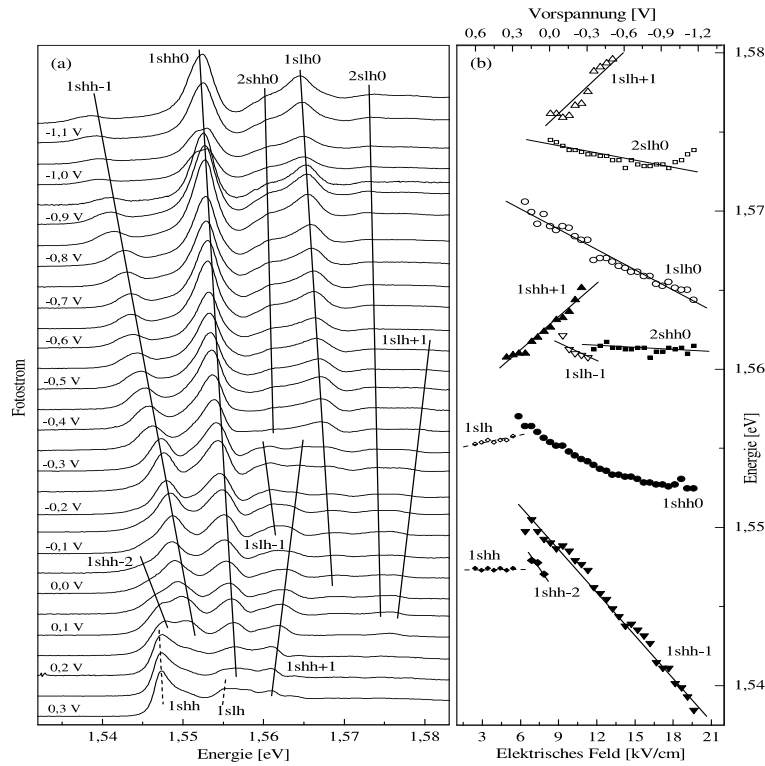


Abbildung 5.4: Experimentelle Wannier-Stark-Leiter [Hum99]

Näherung heisst die Eigenwert-Gleichung:

$$\left(\epsilon(k) - ie\mathcal{E} \frac{\partial}{\partial k} - \epsilon \right) \psi(k) = 0 \quad . \quad (5.13)$$

Sie hat die Lösung

$$\psi(k) = \psi(0) \exp \left(\frac{i}{e\mathcal{E}} \int_0^k dq (\epsilon - \epsilon(k)) \right) . \quad (5.14)$$

Da die Wellenfunktion der Periodizitätsbedingung einer jeden Bloch-Funktion unterworfen ist, folgt für die Energie-Eigenwerte mit der diskreten Quantenzahl m

$$\epsilon_m = me\mathcal{E}l + \frac{l}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{l}} dq \epsilon(q) \quad (5.15)$$

Bildet man die Differenz zweier benachbarter Eigenwerte, so zeigt sich sofort die äquidistante Struktur, die den Begriff der Wannier-Stark-Leiter geprägt hat:

$$\epsilon_{m+1} - \epsilon_m = e\mathcal{E}l \quad (5.16)$$

Denkt man die Aufspaltung des Spektrum als Funktion des elektrischen Feldes, so spricht man aufgrund des linearen Zusammenhangs auch vom „Wannier-Stark-Fächer“. In Fotostrom-Messungen (Abbildung 5.4) ist dieser Fächer unseres einfachen Bildes beobachtbar, wenn auch mit deutlichen Abweichungen, die unter anderem auf exzitonische Effekte zurückzuführen sind.

5.2 Die Bloch-Gleichungen mit elektrischem Feld

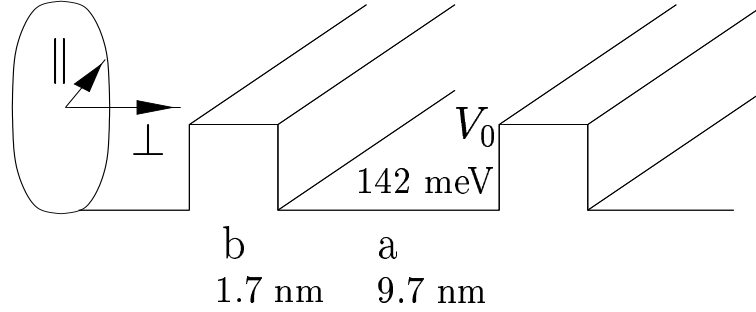


Abbildung 5.5: Geometrie des Übergittermodells

Nachdem im vorherigen Abschnitt Form und Wirkung des zusätzlichen, auf das elektrische Feld zurückgehenden Terms dargelegt wurde, werden die Bloch-Gleichungen so modifiziert, dass sie der Geometrie des Übergitters (Abb. 5.5) bei angelegtem Feld gerecht werden. Der einfachste Fall betrachtet ein Zweiband-Einminiband-Modell: Sowohl für Leitungselektronen als auch für eine Art von Löchern (schwere Löcher) wird in der Übergitterrichtung nur jeweils das erste Miniband berücksichtigt, in der Schichtebene sind die Dispersionen parabolisch. Von daher wird der Minibandindex unterdrückt, die Quantenzahlen sind $\vec{k} = (\vec{k}_{||}, k_{\perp})$, wobei $\vec{k}_{||} = (k_y, k_z)$ und $k_{\perp} = k_x$. Die Gesamtdispersion ist additiv

$$\epsilon^i(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}_{||}^2}{2m_i} + \epsilon_{k_{\perp}}^i \quad . \quad (5.17)$$

$\epsilon(k_{\perp})$ repräsentiert die Minibandstruktur, die für illustrative Zwecke (Abschnitt 5.1) mit $\frac{\Delta_i}{2}(1 - \cos(k_{\perp}l))$ modelliert wird; im nächsten Abschnitt 5.3 wird das Kronig-Penney-Modell vorgestellt, um die Minibandstruktur aus der idealisierten Potentialanordnung der Heterostruktur berechnen. Vom elektrischen Feld wird lediglich der Driftterm innerhalb des Bandes eingebaut, so dass die Bloch-Gleichungen lauten

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\vec{k}}^i}{\partial t} &= \text{Im} \left\{ \Omega_{\vec{k}}^* P_{\vec{k}} \right\} - \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_{\perp}} f_{\vec{k}}^i - \frac{\partial f_{\vec{k}}^i}{\partial t} \Big|_{coll} \\ \frac{\partial P_{\vec{k}}}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \epsilon(\vec{k}) + \frac{i}{2} \Omega_{\vec{k}} \left(1 - f_{\vec{k}}^e - f_{\vec{k}}^h \right) - \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_{\perp}} P_{\vec{k}} - \frac{\partial P_{\vec{k}}}{\partial t} \Big|_{coll} \end{aligned} \quad (5.18)$$

mit

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon^e(\vec{k}) + \epsilon^h(\vec{k}) - \Delta \quad (5.19)$$

und der Rabi-Frequenz

$$\Omega(\mathbf{k}, t) = d_{DM} D_{1,1,k_\perp} E_0(t) \quad (5.20)$$

sowie den Symbolen E_0 für die Einhüllende des optischen Feldes. Die Rotierende-Welle-Näherung ist durchgeführt, so dass es sich bei Δ — wie üblich — um die Verstimmung handelt. d_{DM} beschreibt wiederum das Interband-Dipolmatrixelement für den Volumenfall, das ganz analog zu Abschnitt 3.3 modifiziert werden muss, weil man es statt mit ebenen Wellen mit Übergitter-Bloch-Funktionen zu tun hat:

$$D_{n,n',k_\perp} = \int dx \left(u_{n,k_\perp}^e(x) \right)^* u_{n',k_\perp}^h(x) \quad (5.21)$$

Insbesondere zeigen sich hier Auswahlregeln in den Minibändern, da n und n' aufgrund der Symmetrie entweder beide gerade oder ungerade sein müssen.

Für diese Illustration sind weder Hartree-Fock-Terme berücksichtigt noch Stoßterme, die über eine phänomenologische Dämpfung der Interband-Polarisation hinausgehen. Dagegen ist es instruktiv, sich kurz einem scheinbar ausschließlich technischen Detail bei der numerischen Realisation zu widmen. Bei den Bloch-Gleichungen handelt es sich um nichtlineare, gekoppelte Differenzialgleichungen, erschwerend in Anwesenheit eines elektrischen Feldes macht sich zusätzlich zur zeitlichen Ableitung die Ableitung nach k_\perp bemerkbar: Man hat es also mit partiellen Differenzialgleichungen zu tun, deren numerische Lösung dann — nichttrivial — auf einem Gitter geschehen müsste. Dieses Problem lässt sich dadurch umgehen, dass man in ein sich bewegendes Referenzsystem wechselt und somit die Ableitungen nach k_\perp eliminiert:

$$f_{\vec{k}}^i(t) = \bar{f}_{\vec{k} - \frac{e\mathcal{E}\vec{e}_\perp}{\hbar}t}^i(t) \quad (5.22)$$

$$P_{\vec{k}}(t) = \bar{P}_{\vec{k} - \frac{e\mathcal{E}\vec{e}_\perp}{\hbar}t}(t) \quad (5.23)$$

$$\vec{\bar{k}} = \vec{k} - \frac{e\mathcal{E}\vec{e}_\perp}{\hbar}t \quad (5.24)$$

Führt man diese Transformation durch, so nehmen die Gleichungen in den neuen Größen die gewohnte Form ohne elektrisches Feld an, mit der einen Ausnahme, dass die Dispersionsrelation jetzt zeitlich veränderlich ist:

$$\epsilon(\vec{k}) \rightarrow \epsilon(\vec{k} + \frac{e\mathcal{E}\vec{e}_\perp}{\hbar}t) \quad (5.25)$$

Das ist natürlich kein Zufall, sondern Ausdruck des Beschleunigungstheorems: Anstatt zu beobachten, wie das Wellenpaket beschleunigt wird und die Dispersionskurve im k -Raum durchläuft, setzt sich hier die Perspektive vom Schwerpunkt des Wellenpaketes durch, dem es natürlich so vorkommt, als bewege sich die Dispersionskurve.

Dass es sich bei der vollzogenen Manipulation um nichts anderes als eine Eichtransformation handelt, ist in [Ross98] dargelegt. Sie trägt der Tatsache Rechnung, dass das elektrische Feld ebenso gut durch ein Vektorpotential hätte beschrieben werden können (siehe Abschn. 2.3. Abschließend bleibt noch die Bemerkung, dass man sich auch hier für die THz-Signale auf die Intraband-Komponenten des Stromes beschränken darf, für die aufgrund der Geschwindigkeitsdefinition 5.4 gilt

$$\langle J \rangle = \langle J^e \rangle + \langle J^h \rangle \quad , \quad \langle J^i \rangle = \sum_{\vec{k}} e^i \frac{\partial}{\partial k_{\perp}} \epsilon^i(\vec{k}) f_{\vec{k}}^i(t) \quad . \quad (5.26)$$

Als Anwendung betrachte man Abbildung 5.6.

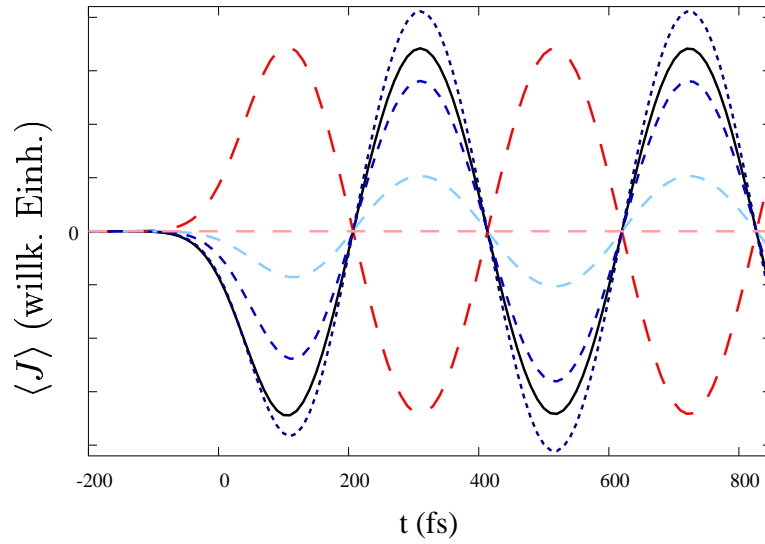


Abbildung 5.6: Stromdichte in Abhängigkeit der Anregung Verstimmung/Minibandbreite-Verhältnisse α : in aufsteigender Strichunterbrechung und von schwarz über blau nach rot: $\alpha = 0, 0.15, 0.35, 0.45, 0.5, 1$ (eindimensional)

Hier wurde in einem eindimensionalen Modell mit cos-förmiger Dispersion der Strom berechnet. Ganz ähnlich wie in Kapitel 3 zeigt diese Anwendung den Einfluss der Anregungsbedingungen. Die Kurven unterscheiden sich einzig in der Trägerfrequenz des Laserpulses. Regt man an der unteren (schwarz, durchgezogen) bzw. an der oberen (rot, lange Lücken) Bandkante an, so unterscheiden sich die Ströme ausschließlich um das Vorzeichen. Regt man leicht oberhalb der unteren Bandkante an, so „geht weniger des Pulses daneben“, die Anregung ist effektiver, es werden mehr Ladungsträger erzeugt, die Stromamplitude ist größer. Wie man aber beim Vergleich der Kurven

des Stromes (Abb. 5.6) und der erzeugten Teilchenzahl (Abb. 5.7) sofort sieht, trägt dieses Argument nicht besonders hoch ins Band hinein. Wir definieren das Verhältnis der Verstimmung zur Minibandbreite

$$\alpha = \frac{\Delta}{\Delta^e + \Delta^h} \quad , \quad (5.27)$$

so dass $\alpha = 0$ die untere und $\alpha = 1$ die obere Bandkante markieren. Schon bei $\alpha = 0.35$ ist die Stromamplitude trotz deutlich mehr erzeugter Teilchen unter die Amplitude bei Anregung an den Bandkanten abgesunken. Den Höhepunkt dieser Entwicklung markiert die Anregung genau in der Mitte des Bandes ($\alpha = 0.5$), es werden maximal viele Teilchen erzeugt und dennoch verschwindet der Strom.

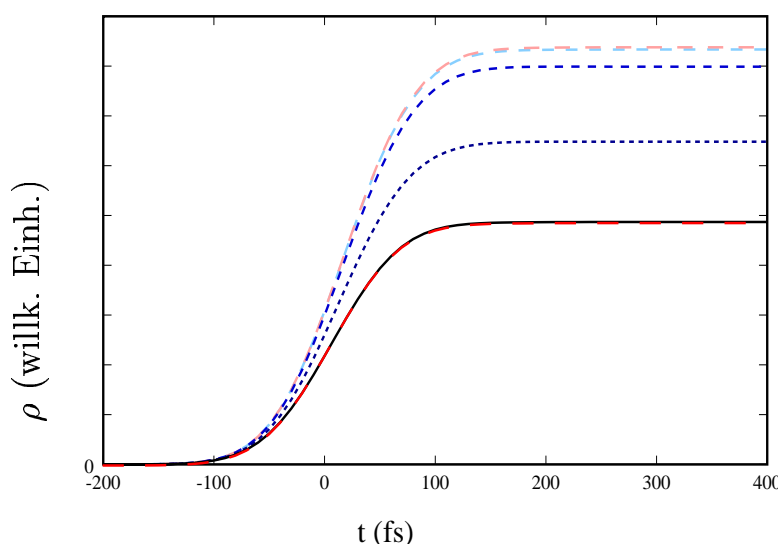


Abbildung 5.7: Teilchendichte in Abhängigkeit des Verstimmung/Minibandbreite-Verhältnisse α : in aufsteigender Strichunterbrechung und von schwarz über blau nach rot: $\alpha = 0; 0.15; 0.35; 0.45; 0.5; 1$ (eindimensional)

Dieses Phänomen ist unter dem Namen der „atmenden Mode“ in der Literatur bekannt [Dig94] und beobachtet [Sud, Lys99]. Es hat damit folgende Bewandnis: Blochs Gedanke war ja, es werde ein Wellenpaket durch das elektrische Feld entlang der Dispersionskurve getrieben. Bei der Anregung an der unteren oder oberen Bandkante geschieht genau das: Ein Wellenpaket wird erzeugt und anschließend bewegt es sich beschleunigt die Dispersionskurve entlang. Was aber geschieht bei einer Anregung in der Mitte des Minibandes? Da wird gar nicht *ein* Wellenpaket kreiert: Genauso wie eines um ein $k_x l = \pi/2$ zentriert erzeugt wird, wird auch eines bei $-k_x l = -\pi/2$

angeregt, da ja beide Punkte der gleichen Energie entsprechen (Abb. 5.8 links). Hier endet das Symmetrieargument keineswegs: Da die Punkte genau um π verschoben liegen, ist die Dispersion und damit auch die Geschwindigkeit an diesen Punkten bis auf entgegengesetztes Vorzeichen identisch, die Beiträge heben sich weg.

Im Wannier-Stark-Bild bedeutet eine Anregung Erzeugung einer Überlagerung ver-

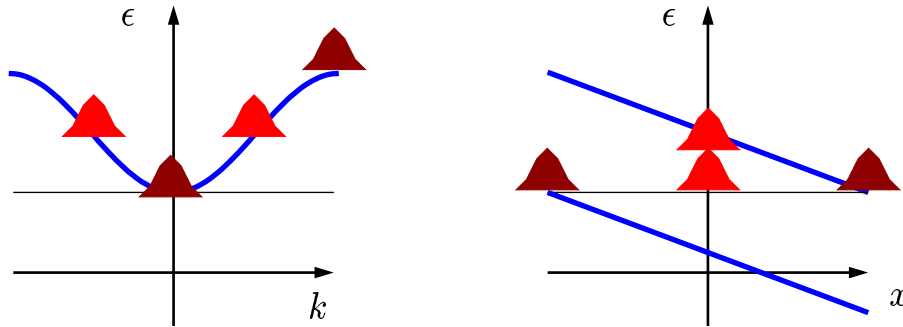


Abbildung 5.8: Illustration der atmendenden Mode im k -Raum (links) und im Ortsraum (rechts) $t = 0$ rot, $t = T_{BO}/4 = 2\pi/(\omega_{BO}4)$ braun

schiedener Zustände der Wannier-Stark-Leiter. Stimmt die Anregungsenergie nun genau mit der Energiedifferenz zwischen Loch- und Elektron-Zustand im gleichen Topf überein, so sind Überlagerungen nach beiden Richtungen des verkippten Übergitters gleich wahrscheinlich. Diese beiden Wellenpakete schwingen vom gleichen Quantentopf aus gegenphasig, es entsteht das Bild einer atmenden Mode (Abb. 5.8 rechts), gegenüber dem lokalisiert gedachten Loch-Wellenpaket heben sich das Gesamtdipolmoment und der Nettostrom weg.

5.3 Das einfache Kronig-Penney-Modell

Ausgangspunkt ist ein Elektron der Masse m in drei Dimensionen. In zwei Dimensionen, der yz -Ebene sei die Bewegung frei, wohingegen entlang der x -Achse eine periodische Aneinanderreihung von Potenzialtöpfen eine Heterostruktur mit unterschiedlichen Bandlücken nachbilden soll (Kronig-Penney-Modell [Kro]). Von möglichen Massenunterschieden in den verschiedenen Halbleiterkomponenten wird dabei abgesehen. Da das Eigenwertproblem separierbar ist, genügt an dieser Stelle die Betrachtung in Übergitterrichtung entlang der x -Achse, für die die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - \epsilon \right\} \psi(x) = 0 \quad (5.28)$$

lautet. Der Potenzialtopf genügt dabei der Bedingung

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & -b < x < 0 \\ 0 & 0 < x < a, \end{cases} \quad (5.29)$$

und deren Fortsetzung gewährleistet nach Abbildung 5.9 die Periodizität ($l = a + b$) der Struktur.

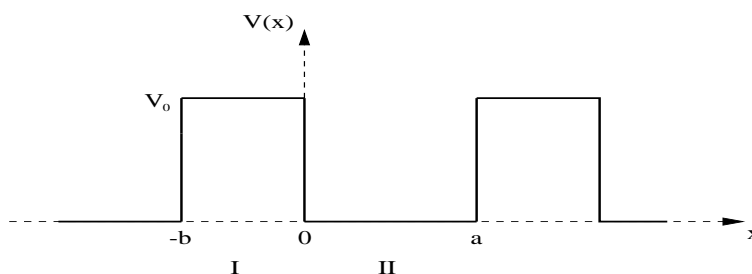


Abbildung 5.9: Das Kronig-Penney-Potenzial

Um die Eigenfunktionen ψ und Eigenwerte ϵ zu bestimmen, bedient man sich einer Superposition der zwei linear unabhängigen Lösungen

$$e^{\pm i\kappa x}, \quad (5.30)$$

wobei der κ stückweise durch

$$\kappa = \begin{cases} \sqrt{\frac{2m(\epsilon - V_0)}{\hbar^2}} & -b < x < 0 \\ \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}} & 0 < x < a, \end{cases} \quad (5.31)$$

definiert ist und für den Fall $\epsilon < V_0$ eine imaginäre Größe darstellt. Es ist daher günstig eine Fallunterscheidung zu treffen und zu definieren:

$$\epsilon > V_0 \quad \Longrightarrow \quad \kappa_1 = \kappa \quad -b < x < 0 \quad (5.32)$$

$$\epsilon < V_0 \quad \Longrightarrow \quad i\kappa_2 = \kappa \quad -b < x < 0 \quad (5.33)$$

Um die Wellenfunktionen in den beiden Regionen zu verbinden, fordert man nun die Kontinuität der Wellenfunktion sowie ihrer Ableitung beim Übergang vom Topf in die Barriere

$$\begin{aligned} \psi_j^I \Big|_{x=0} &= \psi_j^{II} \Big|_{x=0} \\ \frac{\partial}{\partial x} \psi_j^I \Big|_{x=0} &= \frac{\partial}{\partial x} \psi_j^{II} \Big|_{x=0} \end{aligned} \quad (5.34)$$

und stellt an den Enden der Elementarzelle die Bloch-Bedingung in Rechnung:

$$\begin{aligned} \psi_j^I \Big|_{x=-b} &= \psi_j^{II} \Big|_{x=a} e^{-ik_\perp} \\ \frac{\partial}{\partial x} \psi_j^I \Big|_{x=-b} &= \frac{\partial}{\partial x} \psi_j^{II} \Big|_{x=a} e^{-ik_\perp} \end{aligned} \quad (5.35)$$

Die Randbedingung schlagen sich dann in einer Beziehung zwischen der Energie ϵ und der Wellenzahl k_\perp , der Bloch-Vektorkomponente entlang der x -Achse, nieder. Diese Beziehung ist, wie in vielen Lehrbüchern durchexerziert (für Details siehe beispielsweise [Flü]), durch eine einfache transzedente Gleichung gegeben. Für $\epsilon > V_0$ hat man

$$\cos(\kappa_1 b) \cos(\kappa a) - \frac{\kappa_1^2 + \kappa^2}{2\kappa_1 \kappa} \sin \kappa_1 b \sin(\kappa a) = \cos(k_\perp(a+b)) \quad (5.36)$$

Für $\epsilon < V_0$ gilt

$$\cosh(\kappa_2 b) \cos(\kappa a) + \frac{\kappa_2^2 - \kappa^2}{2\kappa \kappa_2} \sinh(\kappa_2 b) \sin(\kappa a) = \cos(k_\perp(a+b)) \quad (5.37)$$

Für eine Leitungsbandkantenverschiebung von $V_0 = 224$ meV zeigt Abbildung 5.10 die numerisch berechnete Minibandstruktur.

Die numerische Lösung der transzendenten Gleichung illustriert deutlich die Bänder, für eine Weiterverarbeitung ist jedoch ein handlicher analytischer Ausdruck wünschenswert. Bei der Frage, wie ein solcher Ausdruck auszusehen habe, kann man sich von der bekannten Näherung starker Bindung leiten lassen; dort sind die Bänder cos-förmig. Es liegt also nahe, als Fit eine Fourier-Entwicklung ins Auge zu fassen,

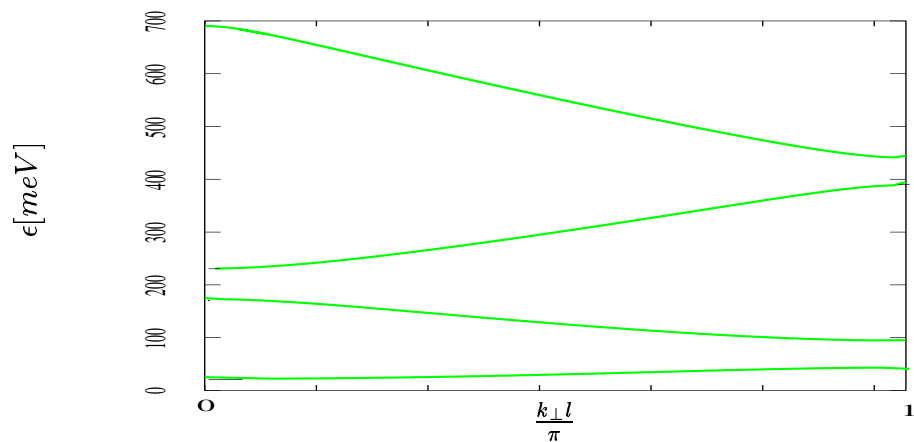


Abbildung 5.10: Die Minibänder der Elektronen in einem GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As Übergitter. ($V_0 = 224$ meV, $a = 9.7$ nm, $b = 1.7$ nm)

Abbildung 5.11 zeigt, dass diese bereits mit drei bzw. vier Termen sehr gute Ergebnisse liefert

(i bezeichnet die Teilchensorte, n ist der Minibandindex) :

$$\epsilon_{fit}^{in}(k) = a_0^{in} + a_1^{in}(\cos(k_{\perp}l) - 1) + a_2^{in}(\cos(2k_{\perp}l) - 1) + a_3^{in}(\cos(3k_{\perp}l) - 1) \quad (5.38)$$

mit

$$\begin{aligned} a_0^{e1} &= -10.29 & a_1^{e1} &= 22.311 & a_2^{e1} &= 1.308 & a_3^{e1} &= 0 \\ a_0^{e2} &= 37.51 & a_1^{e2} &= 172.02 & a_2^{e2} &= 3.215 & a_3^{e2} &= 1.661 \end{aligned}$$

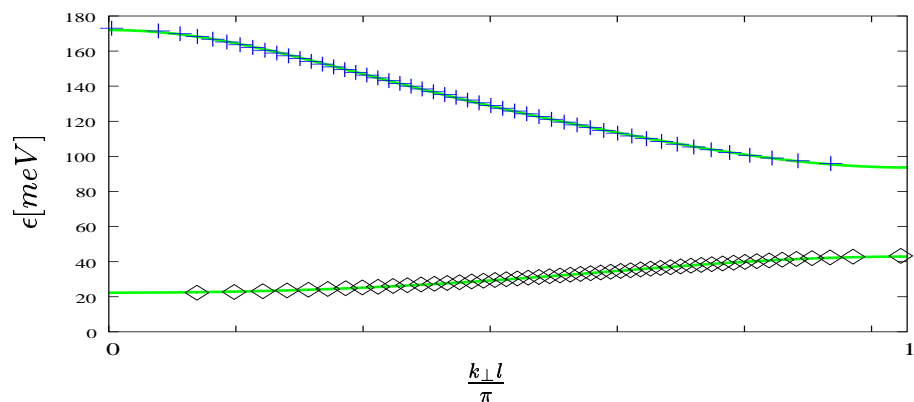


Abbildung 5.11: Fit der ersten zwei Minibänder (Leitungselektronen) durch eine Fourier-Entwicklung

Da das Problem separabel ist und sich die Gesamtenergie also additiv aus den Einzelanteilen zusammensetzt, erhält man die Dispersion

$$E(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}) = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}_{\parallel}^2 + \epsilon(k_{\perp}). \quad (5.39)$$

Im Gegensatz dazu wird sich im folgenden Abschnitt die Situation im Valenzband als weitaus komplexer herausstellen; dort wird die Dispersion in k_{\perp} von \vec{k}_{\parallel} abhängen. Das wird nicht nur zur Folge haben, dass sich die numerische Lösung des Problems weitaus komplexer gestaltet, sondern es wird darüberhinaus auch nicht möglich sein, über einen einfachen Fit wieder zu einem analytischen Ausdruck zu gelangen.

Zuvor jedoch soll Abbildung 5.12 die Zwitterstellung des Übergitters illustrieren. Ausgangspunkt für die Lösung des Kronig-Penney war ein Ebene-Welle-Ansatz freier Teilchen im Potenzialtopf, im Grenzfall verschwindender Barrieren hat man also das kontinuierliche parabolische Spektrum freier Teilchen zu erwarten. Sind hingegen die Barrieren unendlich dick, so hat man es mit der Situation eines isolierten Topfes mit seinen diskreten Energieeigenwerten zu tun.

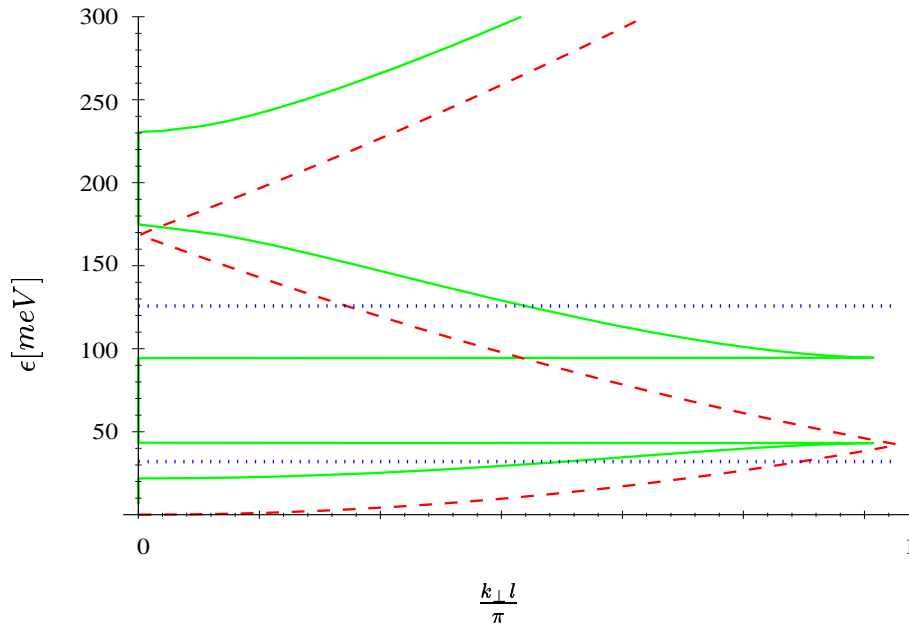


Abbildung 5.12: Die Minibänder der Elektronen in einem GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As Übergitter ($V_0 = 224$ meV, $a = 9.7$ nm, $b = 1.7$ nm) im Vergleich mit dem parabolischen Spektrum eines freien Teilchens (gestrichelt, rot) und den diskreten Energieeigenwerten eines isolierten Quantentopfes (gepunktet, blau)

5.4 Das Kronig-Penney-Modell für die Löcher

Das Valenzband in GaAs ist durch die dreifache Bahndrehimpuls-Entartung (\times zweifache Spinentartung) komplizierter. Denkt man sich die abgespaltenen Bänder ($J = \frac{1}{2}$, J bezeichnet wieder den Gesamtdrehimpuls, siehe Kap. 2) bereits aus dem energetischen Blickfeld abgespalten, so bleiben die $J = \frac{3}{2}$ -Bänder, die im Volumenmaterial die Dispersion der schweren und leichten Löcher ergeben. Zur Beschreibung dieser Bänder dient der sphärische 4×4 -Luttinger-Matrix-Hamilton-Operator:

$$\mathbf{H}(\hat{\vec{p}}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) \hat{\vec{p}}^2 \mathbf{1} - 2\gamma_2 (\vec{\mathbf{J}} \cdot \hat{\vec{p}})^2 \right\} \quad (5.40)$$

mit $\hat{p}_x \equiv i\frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{p}_y \equiv i\frac{\partial}{\partial y}$, $\hat{p}_z \equiv i\frac{\partial}{\partial z}$. Um das Eigenwertproblem in Anwesenheit eines Übergitters zu lösen, ist wie in Abschnitt 2.1 angedeutet, der Wellenvektor wieder in den Differentialoperator zurücktransformiert worden. Bei $\vec{\mathbf{J}}$ handelt es sich um den Vektor der 4×4 -Matrizen, die den Drehimpuls zum Wert $J = 3/2$ beschreiben, $\mathbf{1}$ ist die 4×4 -Einheitsmatrix. In der kanonischen Basis der vier $J = 3/2$ -Zustände lautet der Hamilton-Operator:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} F & M & L & 0 \\ M^* & G & 0 & L \\ L^* & 0 & G & -M \\ 0 & L^* & -M^* & F \end{pmatrix}, \quad (5.41)$$

mit den operatoriellen Matrixeinträgen

$$F(\hat{\vec{p}}) = \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_1 \hat{\vec{p}}^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_2 (\hat{\vec{p}}^2 - 3\hat{p}_z^2) \quad , \quad (5.42)$$

$$G(\hat{\vec{p}}) = \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_1 \hat{\vec{p}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_2 (\hat{\vec{p}}^2 - 3\hat{p}_z^2) \quad , \quad (5.43)$$

$$M(\hat{\vec{p}}) = \frac{\hbar^2}{m} \gamma_2 \sqrt{3} \hat{p}_z (\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \quad , \quad (5.44)$$

$$L(\hat{\vec{p}}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \gamma_2 \sqrt{3} (\hat{p}_x - i\hat{p}_y)^2 \quad . \quad (5.45)$$

Hierbei ist zu beachten, dass bisher noch keine Quantisierungsrichtung von \mathbf{J} definiert ist. Zusätzlich ist noch das Übergitterpotenzial aus Gleichung (5.29) zu addieren, das allerdings nur in der Diagonalen der Gesamtdrehimpuls-Basis beiträgt. Der Gesamt-Hamilton-Operator ist also

$$\mathbf{H}(\hat{\vec{p}}) + V(x)\mathbf{1}. \quad (5.46)$$

Nachdem somit das Problem definiert ist, geht man — analog zum einfachen Kronig-Penney-Modell — an dessen Lösung durch der Ansatz einer faktorisierten Form der Wellenfunktion

$$\Psi(\vec{r}) = e^{-i(k_y y + k_z z)} \psi(x), \quad (5.47)$$

wobei man es jedoch bei $\psi(x)$ in Kongruenz zur Matrix-Struktur des Hamilton-Operators mit einem Vierervektor zu tun hat. Eine weitere von der Matrix-Struktur herrührende Eigentümlichkeit betrifft die Energie: Sie ist im Gegensatz zum einfachen Kronig-Penney-Modell trotz der Faktorisierbarkeit der Wellenfunktion nicht additiv. Obiger Ansatz (Gleichung (5.47)) gibt für die Bewegung entlang der x -Achse

$$\{\mathbf{H}(\hat{p}_x, k_y, k_z) + (V(x) - E)\mathbf{1}\} \psi(x) = 0. \quad (5.48)$$

$\mathbf{H}(\hat{p}_x, k_y, k_z)$ lässt sich jedoch nicht als Summe der Eigenwerte der kinetischen Energie in y - und z -Richtung und des Operators der kinetischen Energie des x -Freiheitsgrades schreiben, wie es im einfachen Modell der Fall war. Vielmehr wird hier offensichtlich, dass die Quantenzahlen $(k_y, k_z) = \vec{k}_{\parallel}$ nunmehr parametrisch in das Eigenwert-Problem in x -Richtung eingehen.

Die allgemeine Lösung dieser Gleichungen kann in jedem der Intervalle $(-b < x < 0)$ und $(0 < x < a)$ kann nach [Ivc] geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_{i=1,2} c_1^i \mathcal{F}_1(+\kappa_i, \vec{k}_{\parallel}) e^{i\kappa_i x} + c_2^i \mathcal{F}_1(-\kappa_i, \vec{k}_{\parallel}) e^{-i\kappa_i x} \\ &+ c_3^i \mathcal{F}_2(+\kappa_i, \vec{k}_{\parallel}) e^{i\kappa_i x} + c_4^i \mathcal{F}_2(-\kappa_i, \vec{k}_{\parallel}) e^{-i\kappa_i x} \end{aligned} \quad (5.49)$$

mit

$$(\kappa_{1,2})^2 = \frac{E - V}{\frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 \pm 2\gamma_2)} - \vec{k}_{\parallel}^2. \quad (5.50)$$

Je nach Intervall ist dabei unter $V \equiv V_0$ (Intervall I , $-b < x < 0$) bzw. $V \equiv 0$ (Intervall II , $0 < x < a$) zu verstehen. Bei den Funktionen \mathcal{F}_1 und \mathcal{F}_2 handelt es sich wiederum um vierzeilige, wie folgt definierte Objekte:

$$\mathcal{F}_1(\kappa, \vec{k}_{\parallel}) = \begin{pmatrix} M(\kappa, \vec{k}_{\parallel}) \\ -F(\kappa, \vec{k}_{\parallel}) \\ 0 \\ L^*(\kappa, \vec{k}_{\parallel}) \end{pmatrix}, \quad \text{und} \quad \mathcal{F}_2(\kappa, \vec{k}_{\parallel}) = \begin{pmatrix} -L(\kappa, \vec{k}_{\parallel}) \\ 0 \\ F(\kappa, \vec{k}_{\parallel}) \\ M^*(\kappa, \vec{k}_{\parallel}) \end{pmatrix}. \quad (5.51)$$

Des Weiteren legt die Rotationsinvarianz des Modells in der y - z -Ebene — wie in [Mat] vorgeschlagen — nahe, \vec{k}_{\parallel} entlang der y -Achse zu wählen, was darin resultiert, dass $k_z = 0$ gilt, und daraufhin die Einträge M in der Matrix-Struktur der

Schrödinger-Gleichung zusammenbrechen ($M(p_x, k_y, 0) = 0$). Folge daraus wiederum ist, dass es zu einer Aufspaltung in zwei zweidimensionale, orthogonale Unterräume kommt. Diese Unterräume sind Kompositionen aus den Zuständen $J_z = \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$, bzw. $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$. Obwohl es also zu einer Separation in orthogonale Unterräume kommt, bleiben Schwer-Loch $J_z = \pm\frac{3}{2}$ und Leicht-Loch-Komponenten $J_z = \pm\frac{1}{2}$ weiterhin gemischt. Dennoch vereinfachen sich damit auch die Lösungen. Im Weiteren wird sich darauf beschränkt, die Eigenwerte in diesen Unterräumen nur für positive Bloch-Vektorkomponenten k_x zu bestimmen, da man die Bänder dergestalt definieren kann, dass die Energie im Hinblick auf eine Inversion von k_x symmetrisch ist. Der Idee des Kronig-Penney-Modells folgend ergeben sich die Randbedingungen wieder aus der Kontinuität des Lösungen sowie deren Ableitungen beim Übergang von Intervall I nach II

$$\psi_j^I \Big|_{x=0} = \psi_j^{II} \Big|_{x=0} \quad , \quad (5.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_j^I \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial x} \psi_j^{II} \Big|_{x=0} \quad , \quad (5.53)$$

sowie der Bloch-Bedingung am Ende der Zelle ($l = a + b$)

$$\psi_j^I \Big|_{x=-b} = \psi_j^{II} \Big|_{x=a} e^{-ik_\perp} \quad , \quad (5.54)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_j^I \Big|_{x=-b} = \frac{\partial}{\partial x} \psi_j^{II} \Big|_{x=a} e^{-ik_\perp} \quad , \quad (5.55)$$

wobei der Symmetrie des Problems angepasst $k_\perp \equiv k_x$ geschrieben wurde. Das Bloch-Problem stellt sich damit also dar als homogenes Gleichungssystem in den Koeffizienten $c_n^{(I)i}$ und $c_n^{(II)i}$ und $i = 1, 2$ und $n = 1, \dots, 4$, dessen Lösungen sich wie üblich aus dem Verschwinden der Determinante bestimmen lassen. Als letztes noch der Hinweis, dass es sich bei den Bloch-Funktionen nicht um Eigenfunktionen zu irgendeiner Komponente des Drehimpulses \mathbf{J} handelt.

5.5 Numerische Ergebnisse

In den Abbildungen 5.13 und 5.14 sind die Energien der ersten drei Loch-Subbänder als Funktionen von k_{\parallel} und k_{\perp} zu sehen. Figur 5.13 zeigt die Lösungen für den Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$ und Figur 5.14 die für den Unterraum $J_z = \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$.

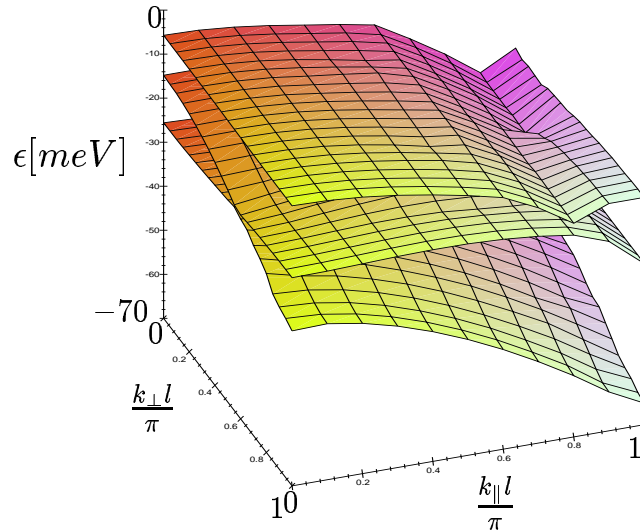


Abbildung 5.13: Loch-Miniband-Struktur im Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$

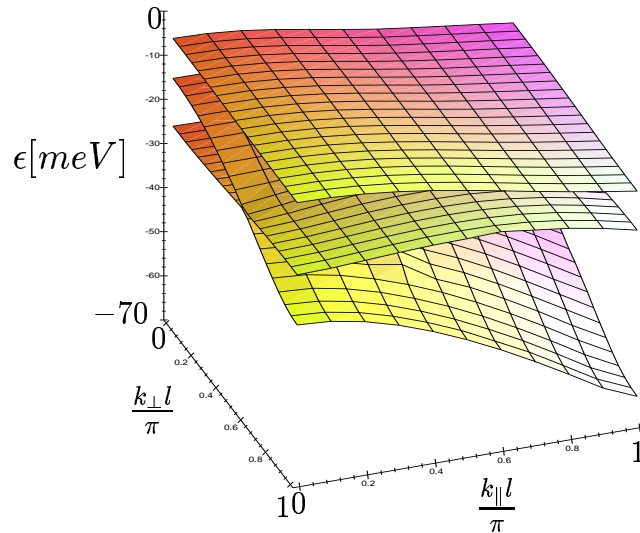


Abbildung 5.14: Loch-Miniband-Struktur im Unterraum $J_z = \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$

Die Interpretation der Kurven gelingt vom pathologischen Fall $k_{\parallel} = 0$. Dort sind die verschiedenen J_z -Komponenten entkoppelt, die Resultate stimmen mit dem überein, was das einfache Kronig-Penney-Modell unter der Annahme von Schwer- und Leicht-Lochmassen liefert (Abb. 5.15). Das oberste Band $\epsilon^1(k_{\perp}, k_{\parallel})$ mit seiner schwa-

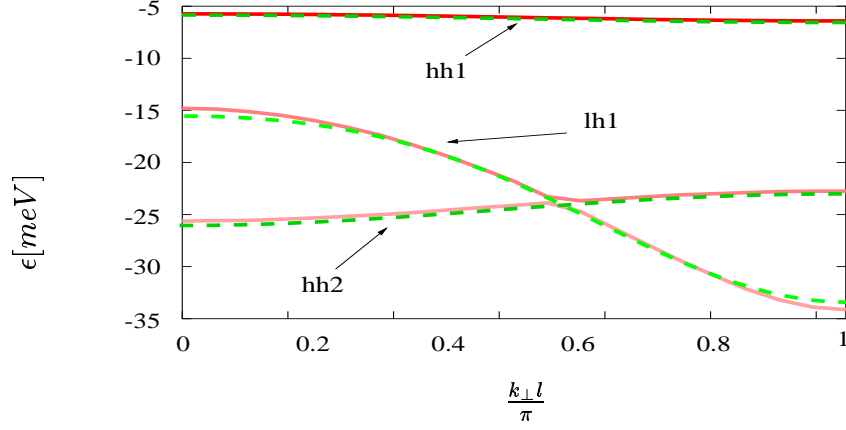


Abbildung 5.15: Identifikation der Minibänder bei $k_{\parallel} = 0$

chen k_{\perp} -Dispersion kann man von daher getrost als erstes Schwer-Loch-Miniband bezeichnen. Komplizierter ist die Situation für die nächsten beiden Bänder $\epsilon^{2/3}(k_{\perp}, k_{\parallel})$. Man sieht deutlich, dass sie sich für $k_{\parallel} = 0$ aus der Kreuzung des ersten Leicht-Loch- und des zweiten Schwer-Loch-Minibandes ergeben, die sich wiederum mit wenigen Fourier-Komponenten (siehe 5.38) fitten lassen (Abb. 5.16 oben).

Abbildung 5.16 (unten) zeigt, dass für $k_{\parallel} \neq 0$ die Kreuzung aufgehoben ist. Für kleine k_{\parallel} gelingt die Beschreibung dieser Überschneidungsvermeidung (anticrossing) sehr gut auf der Grundlage einer Zwei-Niveau-Abstoßungs-Formel:

$$\epsilon_{\pm}(k_{\perp}, k_{\parallel} = 0.1 \frac{\pi}{l}) = \frac{1}{2}(\epsilon^{lh1}(k_{\perp}) + \epsilon^{hh2}(k_{\perp})) \pm \sqrt{\frac{(\epsilon^{lh1}(k_{\perp}) - \epsilon^{hh2}(k_{\perp}))^2}{4} + d^2(0.1 \frac{\pi}{l})} \quad (5.56)$$

mit dem Fitparameter $d(k_{\parallel})$.

Für noch größere Werte von etwa $k_{\parallel} = 0.5 \frac{\pi}{l}$ führen allerdings solche einfachen Fitformeln nicht mehr zum Erfolg.

Ein weiterer Kreuzungseffekt, diesmal in der Variation von k_{\parallel} im Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$ zeigt deutlich wie es hier zur Mischungseffekten und zu Abweichungen von der parabolischen Dispersion in den Schichtebenen kommt.

Die Figuren 5.17 und 5.18 zeigen die Dispersion der Minibänder in k_{\parallel} für die Extremalwerte $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \frac{\pi}{l}$, so dass die schattierte Fläche zwischen diesen

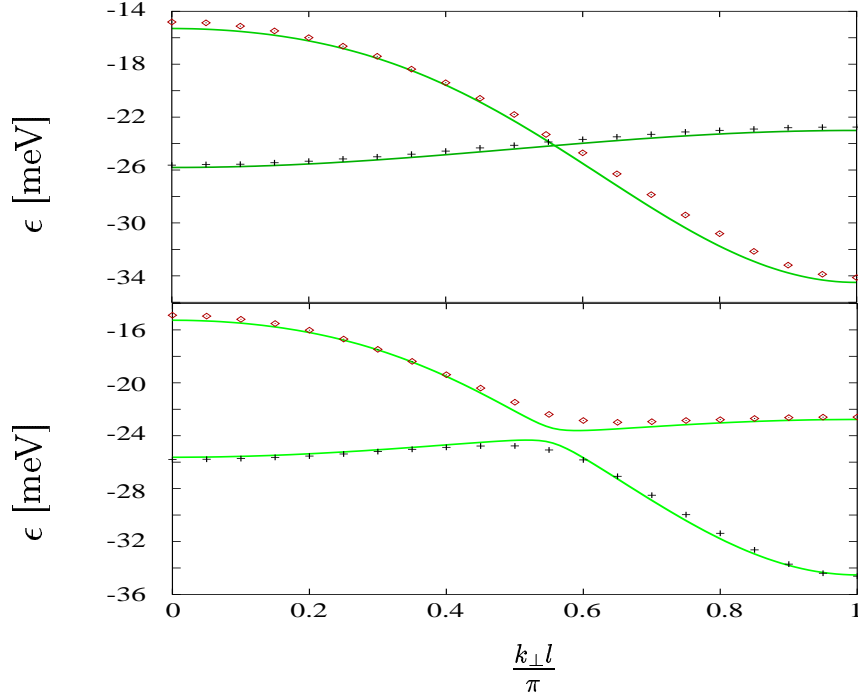


Abbildung 5.16: Bandkreuzung und Bandabstoßung des zweiten und dritten Minibandes im Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$; Bandkreuzung bei $k_{\parallel} = 0$ (oben); Bandabstoßung $k_{\parallel} = 0.1 \frac{\pi}{l}$ (unten). Die Symbole repräsentieren die numerischen Daten, die Linien sind Fits.

„Extremaldispersionen“ als Breite des Minibandes zu interpretieren ist.

Allgemein lässt sich hier festhalten, dass die Loch-Minibänder weitaus schmäler sind als ihre elektronischen Entsprechungen. Das Verhältnis zwischen dem ersten Loch- und dem ersten Elektron-Miniband beträgt 0.018 bei $k_{\parallel} = 0$. Entsprechend klein (0.03) ist auch das inverse Verhältnis der effektiven Massen bei $\vec{k} = 0$ in der Wachstumsrichtung. Die effektiven Massen der Löcher liegen in der Ebene bei $\vec{k} = 0$ zwischen denen des schweren Loches und des leichten Loches im Volumenmaterial, wie man es auch nicht anders erwarten würde, da es ja durch das Supergitter zu einer Mischung der Schwer-Loch- und der Leicht-Loch-Zustände kommt. Im Falle des ersten Minibandes ist es etwa zweimal die Leicht-Lochmasse im Volumenmaterial. Die Bandkreuzungseffekte zwischen dem zweiten und dem dritten Band in der Wachstumsrichtung treten hauptsächlich deshalb auf, weil das dritte Band eine große negative Lochmasse besitzt, während dem zweiten Band eine positive Lochmasse zu eigen ist (wiederum näherungsweise zweimal die Leicht-Lochmasse im Volumenmaterial).

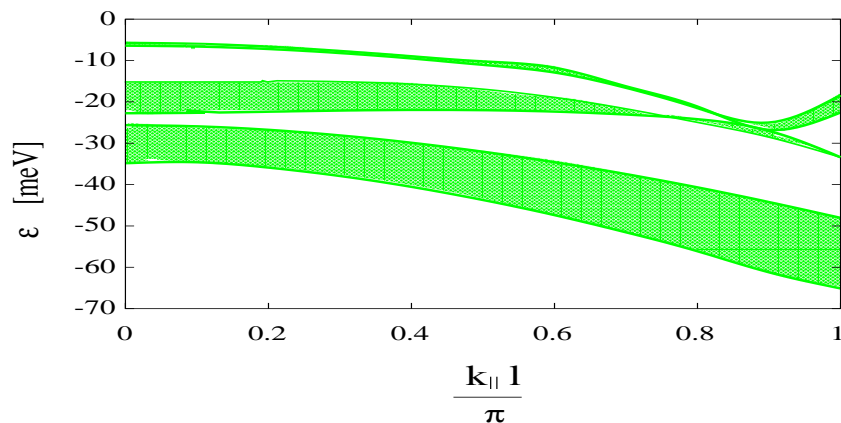


Abbildung 5.17: Dispersion in der Ebene im Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$ bei $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \frac{\pi}{l}$

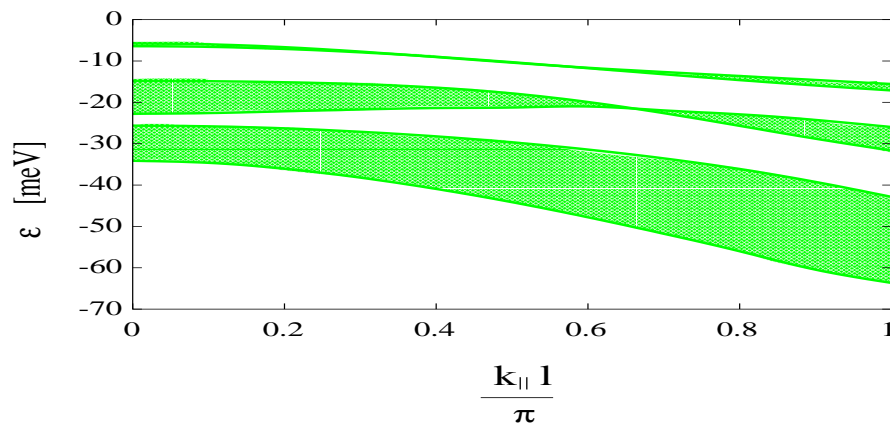


Abbildung 5.18: Dispersion in der Ebene im Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$ bei $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \frac{\pi}{l}$

Insgesamt zeigt sich ein sehr komplexes Spektrum mit Bandkreuzungen und -abstosungen, von denen man annehmen muss, dass sie für die Bloch-Oszillationen der Löcher hinderlich sind. Durch die intime energetische Nachbarschaft der Bänder sollte der dephasierende Einfluss des Zener-Tunnelns hier sehr ausgeprägt sein. Darüber hinaus zeigt sich, dass die resultierenden Bänder im Vergleich zu denen der Elektronen sehr schmal sind, so dass man die Aussage, der Hauptbetrag der Bloch-Oszillationen komme von den Elektronen, durch die Rechnungen bestätigt.

Kapitel 6

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden einige Aspekte der THz-Erzeugung in Halbleitersystemen bearbeitet; die dabei eingeschlagenen Wege und benutzten Methoden waren sehr unterschiedlich.

In Kapitel 3 wurde eine Anregung der Arbeitsgruppe Roskos *et al.* aufgegriffen. Bei Experimenten in der Voigt-Geometrie gekreuzter elektrischer und magnetischer Felder zeigten sich unter Annahme der bekannten Dämpfungszeiten in Systemen ohne angelegte Felder erstaunlich lang THz-Oszillationen. Es galt also nicht nur den Mechanismus der THz-Erzeugung in dieser Geometrie auszuarbeiten, sondern darüber hinaus auf mikroskopischer Ebene die Dämpfungszeiten im Pikosekundenbereich zu erklären. Zur Formulierung des quantenmechanischen Problems kamen die optischen Bloch-Gleichungen zum Einsatz, allerdings in einer der Voigt-Geometrie angepassten Form. In der Basis eines verschobenen Oszillators, in der das Einteilchen-Problem inklusive der beiden konstanten Felder diagonalisiert wird, hat das Spektrum nicht mehr die einfache k^2 -Abhängigkeit der freien Teilchen, sondern ist eine Funktion dreier Variablen: der k_z -Komponente, einer Quantenzahl X , die die Verschiebung des Oszillatorursprungs beschreibt und der diskreten Landau-Quantenzahl n . Zwar sind in dieser Basis die von den konstanten Feldern herrührenden Anteile des Hamilton-Operators diagonal, Modifikationen handelt man sich jedoch sowohl in der Kopplung des optischen Feldes der Laseranregung als auch bei der Kopplung des Dämpfungsmechanismus' der Phononen ein. Bei den optischen Matrixelementen springen dabei zwei Unterschiede zum magnetischen Fall sofort ins Auge: Die magnetischen Auswahlregeln gelten nicht mehr und die Erzeugung von Elektron und Loch geschieht um verschiedene Oszillatorzentren herum (nichtlokal in der Landau-Basis), was sich prinzipiell in einer instantanen Polarisierung niederschlägt. Die Kopplung der Phononen wurde auf einem auf Fermis goldener Regel basierenden Lebensdaueransatz

eingearbeitet. Ergebnis dabei war die Bestätigung der Lebensdauern auf einer Piko-sekundenzeitskala sowie für den untersuchten Parameterbereich der elektrischen und magnetischen Felder ein deutliches Schwellenverhalten. Ist der Hauptteil der für die LO-Phononemission nötigen Energie nicht in kinetischer Energie in z -Richtung oder in Landau-Niveau-Energie vorhanden, so ist die Streuung höchst unwahrscheinlich. Die Ausarbeitung der Kinetik beruht auf einem Näherungsschema infolge der optischen Matricelemente. Es zeigt sich, dass es sich bei den für die THz-Oszillationen verantwortlichen Terme um Intraband-Polarisations-Komponenten handelt. Die Berechnungen der zeitlichen Stromevolution bestätigen sowohl die Dämpfung auf Piko-sekundenzeitskala als auch das Schwellenverhalten, darüberhinaus zeigt sich ein sehr sensibler Charakter im Zusammenspiel von Anregungsenergie und Dämpfungskomponenten (z.B. in dem Wiederaufleben von Oszillationen).

Das Kapitel 4 schlägt anhand eines klassischen Modells zum ersten Mal einen neuen Mechanismus zur THz-Erzeugung vor. Der Wert liegt hierbei nicht auf der direkten Vergleichbarkeit der Ergebnisse mit Experimenten als vielmehr in prinzipiellen Einsichten und in der Extrapolation dessen, was möglicherweise eine quantenkinetische Analyse zu Tage bringen könnte.

Koppelt man in einem elektrischen Feld ein Elektron an das im polaren Halbleiter dominante LO-Phononfeld, so kann man die phononischen Variablen eliminieren und erhält allein für die Elektronvariable eine in der Zeit nichtlokale Gleichung mit Gedächtnis. Die numerische Auswertung dieser Gleichung hat ergeben, dass in Abhängigkeit von den beiden Parametern Feld- und Kopplungsstärke zwei Regime möglich sind: das diffusive, in dem sich das Elektron mit asymptotisch konstanter Geschwindigkeit bewegt, und das ballistische, in dem es eine asymptotisch konstante Beschleunigung antreibt. Das hier untersuchte Vielelektronen-System lässt sich durch die Wahl geeigneter, die Situation im Halbleiter simulierender Anfangsbedingungen exakt lösen. Obwohl der Ausdruck mathematischer Asymptotik nicht mehr anwendbar ist, wird auch der Vielteilchen-Fall von den beiden erwähnten Regimen beherrscht, wobei die Aussagen jetzt für die zeitlichen Mittelwerte der Koordinaten-, Geschwindigkeits- und Beschleunigungsevolution zu verstehen sind. Darüberhinaus kommt es zu einer phononvermittelten Wechselwirkung der Elektronen, die sich in Oszillationen mit der charakteristischen LO-Phononfrequenz niederschlägt. Im Gegensatz zu dem Modell in Kapitel 3, sind die Phononen hier keineswegs der Dämpfungsmechanismus, sondern unbedingter Bestandteil zur Erzeugung der THz-Strahlung.

Kapitel 5 liefert einen Beitrag zu den vieldiskutierten Bloch-Oszillationen. Die Diskussion beschränkt sich hierbei in den allermeisten Fällen auf die Leitungselektronen, wohingegen die Löcher kaum behandelt werden. Begründet wird dies allgemein damit, dass die weitaus größere Masse der schweren Löcher sie sehr stark lokalisiert, bzw. die Stromamplitude durch die flache Dispersion sehr begrenzt ist. Über die leichten Löcher wird mit Hinweis auf die schwächere Kopplung meist kaum ein Wort verloren. Die Probleme mit diesen Argumenten beginnen bereits bei der Terminologie. Die Begriffe der schweren bzw. leichten Loches dienen zu Beschreibung von Volumenmaterialien. Ihre Übertragung auf den Fall des Übergitters ist insofern problematisch, als dass durch das Übergitter die Isotropie gebrochen wird und es zu Mischungen der verschiedenen Drehimpuls-Zustände kommt. Inwiefern sie als Näherung weiterhin gerechtfertigt ist, und welcher Art eventuelle Modifikationen sind, wird hier anhand einer oft verwandten und typischen Übergitterkonfiguration geprüft. Dazu wird die Dispersionsrelation der niedrigsten Valenzband-Minibänder berechnet. Diese ist aufgrund der Heterostruktur nicht mehr in den Quantenzahlen der Kristallimpulskomponenten additiv, sondern die Quantenzahlen in Schichtebene gehen parametrisch in die Berechnung senkrecht zu den Schichtebenen ein. Es kommt in den Schichtebenen zu deutlich Abweichungen von den parabolischen Dispersionen. Insbesondere die Überlappung dessen, was für $k_{\parallel} = 0$ das zweite Schwer-Loch- und das erste Leicht-Loch-Miniband bezeichnet, führt zu starken Abstoßungsphänomenen zwecks Vermeidung der Überschneidung (anticrossings). Generell lässt sich mit diesen Befunden nun die Aussage fundiert untermauern, dass die Löcher aufgrund geringer Dispersion in den Minibändern nur schwach zum THz-Signal beitragen.

Anhang A

Stoßterme für die Intraband-Größen in der Voigt-Geometrie

Nachdem die Kopplung an die Phononen in der Basis des verschobenen Oszillators formuliert wurde (Abschn. 3.4), haben wir von einer detaillierten Bilanzierung der konkreten Streueignisse abgesehen und sie stattdessen durch quantenzahlabhängige Lebensdauern simuliert. Dass mit Hilfe dieser Lebenszeiten die experimentellen Befunde [Som96, Som94, Bau] von einer Dämpfung des THz-Strahlung im Piko-sekundenbereich untermauert werden konnten, rechtfertigt nachträglich das Näherungsschema. Im Zusammenhang damit, was der Lebensdaueransatz nicht zu leisten vermag, wird hier ansatzweise skizziert, wie eine Erweiterung zu einer Boltzmann-artigen Formulierung der Stoßprozesse aussähe. Die Struktur der Kopplung ist dabei so, dass eine exakte Behandlung nicht möglich ist, da sie zu einer unendlichen Hierarchie von gekoppelten Gleichungen führt, die simultan gelöst werden müssten. Für die näherungsweise Behandlung der Kinetik solcher Vielteilchen-Systeme haben sich die Diagrammtechnik [Hau96] und die Bewegungsgleichungsmethode [Bon, Kuh] etabliert. Die Diagrammtechnik konnte ihre Vorteile vor allem bei der komplexeren Elektron-Elektron-Wechselwirkung ausspielen [Ban98, Vu], dies wird aber durch den nicht-trivialen Apparat der Nicht-Gleichgewichts-Green-Funktionen erkauft. In unserem, konzeptionell eher schlichten Problem führt die Bewegungsgleichungsmethode schneller zum Ziel, so dass hier die Hauptetappen dieses Gedankenganges dargelegt werden.

Berechnet man die zeitliche Änderung der reduzierten Einteilchendichtematrix unter Verwendung der Liouville-Gleichung, entstehen auf der rechten Seite Erwartungswerte von einem Produkt von drei Operatoren. Für diese höheren Dichtematrizen können nun ebenfalls die Bewegungsgleichungen berechnet werden. In deren Gleichung wird

nun das Ergebnis durch Faktorisierung in Einteilchendichtematrizen vereinfacht, die unendliche Hierarchie wird also an dieser Stelle abgebrochen. Die Gleichungen für die höheren Dichtematrizen werden nun formal integriert und in die Gleichungen der Einteilchendichtematrix eingesetzt. Das Ergebnis ist die quantenkinetische Gleichung für die Streuung von Elektronen durch Wechselwirkung mit Phononen. Typisch für solche Gleichungen ist, dass die Anfangs- und Endzustände der Streuprozesse zu früheren Zeiten in den Zeitintegralkern eingehen, es sind also Gedächtniseffekte enthalten, man spricht von einer Nicht-Markov-Gleichung. Die Parallele zum Vorgehen im klassischen Polaronmodell ist alles andere als zufällig, dort jedoch gelang die Elimination der phononischen Freiheitsgrade exakt, wohingegen hier zunächst ein Abbruch der Kopplung an höhere Dichtematrizen nötig war. Zu einer Markov-Gleichung gelangt man, wenn die Gedächtnistiefe klein und die Dichtematrixelemente hinreichend langsam veränderlich sind, so dass man sie vor das Zeitintegral ziehen und zur aktuellen Zeit auswerten kann. Das verbleibende Zeitintegral führt für große Zeiten auf eine exakt energieerhaltende Deltafunktion (Energiekorrekturen durch die Hauptwertterme sind vernachlässigt), so dass man es nunmehr mit einer in der Zeit lokalen, Boltzmann-artigen Markov-Gleichung zu tun hat. Erwähnt werden müssen an dieser Stelle noch weitere Näherungen und Vereinfachungen: Die Säkularisierungsbedingung vernachlässigt schnell oszillierende Terme; zufällige Entartungen verschwinden aufgrund von Volumenbetrachtungen und schließlich sind die in der Interband-Polarisation quadratischen Terme vernachlässigt. Behält man die Tief-Temperatur-Näherung bei (siehe Abschn. 3.4), dass nur Phononemission möglich ist, so lauten die für die THz-Oszillationen relevanten Stoßterme der Intraband-Größen

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_{coll} f_{nn'Xk_z}^i = & -\frac{\pi}{\hbar} \sum_{mYp_z} \left\{ G_{n'Xk_zmYp_z} \left[(1 - f_{mmYp_z}^i) f_{nn'Xk_z}^i \delta(\epsilon_{mYp_z}^i - \epsilon_{nXk_z}^i + \hbar\omega_{LO}) \right. \right. \\
& \left. \left. - f_{mmYp_z}^i (\delta_{nn'} - f_{nn'Xk_z}^i) \delta(\epsilon_{nXk_z}^i - \epsilon_{mYp_z}^i + \hbar\omega_{LO}) \right] \right. \\
& - G_{mYp_znXk_z} \left[(\delta_{nn'} - f_{nn'Xk_z}^i) f_{mmYp_z}^i \delta(\epsilon_{n'Xk_z}^i - \epsilon_{mYp_z}^i + \hbar\omega_{LO}) \right. \\
& \left. \left. - f_{nn'Xk_z}^i (1 - f_{mmYp_z}^i) \delta(\epsilon_{mYp_z}^i - \epsilon_{n'Xk_z}^i + \hbar\omega_{LO}) \right] \right\} \quad (A.1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{nXk_z n'Yp_z} &= \sum_{\vec{q}} |g_{\vec{q}}|^2 \\
&= \frac{1}{L_y L_z} \frac{\hbar\omega_c}{2\pi} \frac{4\pi\alpha(\hbar\omega_{LO})^{3/2}}{\sqrt{2\hbar\omega_c}} l \\
&\quad \times \int dq_x \frac{|\int dk_x e^{ik_x(X-Y)} \tilde{\phi}_n^*(k_x) \tilde{\phi}_{n'}(k_x - q_x)|^2}{q_x^2 + \frac{1}{\ell^4}(X-Y)^2 + (k_z - p_z)^2} \quad (\text{A.2})
\end{aligned}$$

Deutlich sichtbar ist, dass die Stoßterme die Verteilungen über die Laserpuls-Anregung hinaus mit den Intraband-Polarisationen koppeln, dies ist aber insofern keine grundsätzliche Schwierigkeit, da auf dieser Ebene keine problematische Gleichgewichtsverteilung eingeht, die Verteilungen werden instantan ausgewertet (siehe Diskussion in Abschn. 3.6). Allerdings zeigt sich in der energieerhaltenden Deltafunktion die Asymmetrie der Streuung aufgrund des elektrischen Feldes. Konsequenz daraus ist, dass es nunmehr nicht mehr möglich ist, die räumliche Koordinate Y wegzuintegrieren. Die räumlichen Koordinaten müssten also durch Randbedingungen begrenzt werden, wobei man vor die Optimierungsaufgabe zwischen numerischer Realisierbarkeit und dem Einfluss der Randbedingungen gestellt ist. Aufgrund der Stöße kommt es hier zur Ladungstrennung zwischen Elektronen und Löchern, was zusammen mit den Randbedingungen dazu verpflichtete, über das daraus entstehende Feld nachzudenken (selbstkonsistente Berechnung des elektrischen Feldes). Hierbei sei an den Vergleich der klassischen Kurven mit und ohne Reibungsterm erinnert. Man sieht, dass auf quantenmechanischer Ebene die makroskopische Ladungstrennung durch die Stoßterme realisiert wird.

Anhang B

Der dynamische Franz-Keldysh-Effekt in der Voigt-Geometrie

Hand in Hand mit der Erzeugung von THz-Strahlung geht der Gedanke, den Einfluss einer solchen Strahlung auf Halbleitercharakteristika zu untersuchen. Hat man an die Übergitter ohnehin ein elektrisches Feld angelegt, so ist der theoretische Sprung, die Untersuchung auf zeitlich oszillierende Felder auszuweiten, naheliegend. Die dabei beobachteten bzw. vorausgesagten Effekte eines sich lokal konzentrierenden Wellenpaketes bzw. eines Kollapses des Minibandes laufen unter dem Namen „dynamische Lokalisierung“ [Dun, Hol, Mei98, Mei95, Kea, Win]. Ausgehend vom Effekt eines statischen Feldes auf die Absorption [Fra, Kel], der bereits bei der Diskussion der lokalen Zustandsdichte (Abschn. 3.5) erwähnt wurde, hat sich der dynamische Franz-Keldysh-Effekt zu einem aktuellen Untersuchungsfeld entwickelt [Yac, Reb, Jau, Nor, Hug]. Im Geiste dieser Arbeiten integrieren wir ein zusätzliches zeitlich oszillierendes elektrisches Feld in die Voigt-Geometrie und berechnen die Absorption.

Der zusätzliche Term im Hamilton-Operator ist

$$H_E(t) = - \sum_i e^i E(t) x \quad , \quad E(t) = \mathcal{E}_t \cos(\omega_t t + \varphi_0) \quad . \quad (\text{B.1})$$

Einziger Unterschied ist — wie durch die Notation angedeutet — die Zeitabhängigkeit des Feldes. Um die Matrixelemente zu berechnen, macht man sich zunächst die Verschiebung

$$\int dx \phi_n^*(x - X) \hat{x} \phi_{n'}(x - X) = \int dx \phi_n^*(x) \hat{x} \phi_{n'}(x) + X \delta_{n,n'} \quad (\text{B.2})$$

und dann den Ausdruck des Ortsoperators in Erzeugern und Vernichtern des harmonischen Oszillators

$$\hat{x} = \frac{\ell}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \quad (\text{B.3})$$

zunutze. Der zusätzliche Ausdruck im zweitquantisierten Hamilton-Operator ergibt sich dann zu:

$$H_E(t) = - \sum_i e^i E(t) \sum_{n,n',X,k_z} \left(\frac{\ell}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n'} \delta_{n,n'-1} + \sqrt{n'+1} \delta_{n,n'+1} + X \delta_{n,n'} \right) \right) a_{nXk_z}^{i\dagger} a_{n'Xk_z}^i \quad (\text{B.4})$$

In den Halbleiter-Bloch-Gleichungen hat man daher die zusätzlichen Terme

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_{n,n',X+\sigma^i\xi/2,k}^i &= \dots + D \left(\sqrt{n'+1} f_{n,n'+1,X+\sigma^i\xi/2,k}^i - \sqrt{n} f_{n-1,n',X+\sigma^i\xi/2,k}^i \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{n'} f_{n,n'-1,X+\sigma^i\xi/2,k}^i - \sqrt{n+1} f_{n+1,n',X+\sigma^i\xi/2,k}^i \right) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_{nn'Xk} &= \dots + D \left(\sqrt{n'+1} P_{n,n'+1,X,k} - \sqrt{n} P_{n-1,n',X,k} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{n'} P_{n,n'-1,X,k} - \sqrt{n+1} P_{n+1,n',X,k} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

mit dem Vorfaktor

$$D = -\frac{i}{\hbar} \frac{e^i E(t) \ell}{\sqrt{2}}, \quad (\text{B.7})$$

wobei wiederum die Vorzeichenfunktion σ^i benutzt wurde (siehe Abschn. 3.1).

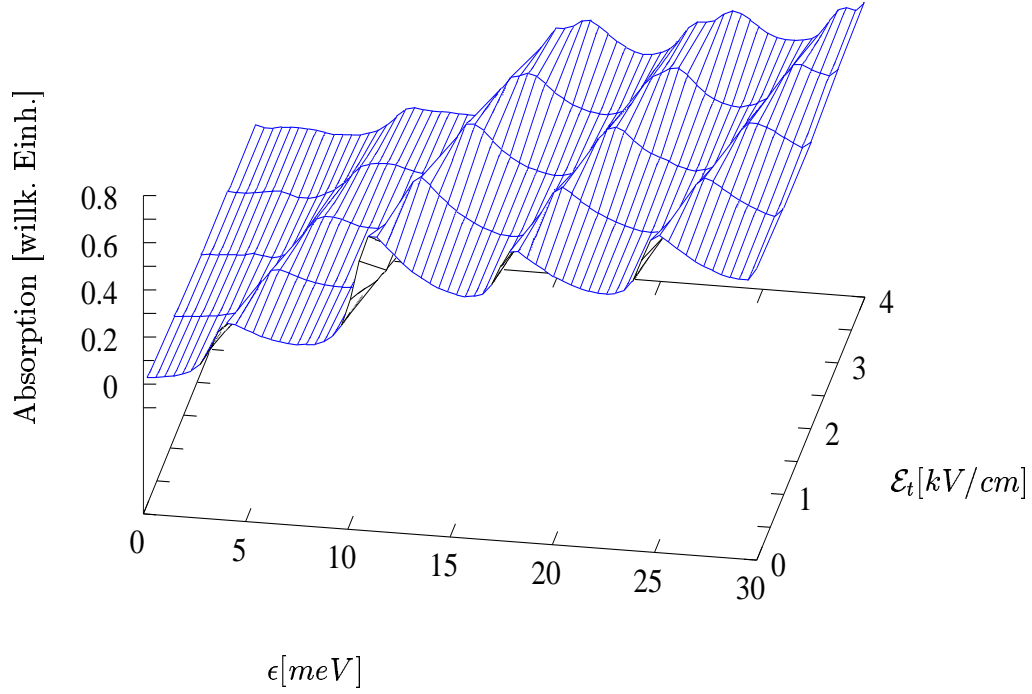


Abbildung B.1: Absorption als Funktion der Energie und der Amplitude des Wechselfeldes \mathcal{E}_t , $\mathcal{E} = 4 \text{ kV/cm}$, $\mathcal{B} = 4 \text{ T}$

Um zu sehen, wie sich das zeitabhängige Feld auswirkt, ist in Abbildung B.1 die Absorption gegen die Energie und die Amplitude des Wechselfeldes aufgetragen. Es ist deutlich zu sehen, wie sich die Charakteristika der Absorption mit wachsender Amplitude der zeitlich veränderlichen Feldes blauverschieben. Eine Beobachtung, die bei allen Unterschieden des Systems an die bereits bekannten Befunde des Franz-Keldysh-Effektes denken lässt [Jau, Nor, Joh].

Anhang C

Bloch- und Wannier-Funktionen

Als Basis des gitterperiodischen Problems empfehlen sich die Bloch-Funktionen zur Behandlung der Bloch-Oszillationen (erste Arbeiten:[Blo, Zen, Kan59, Arg]). Die zusätzliche Diagonalisierung des elektrischen Feldes führt dann zu zeitabhängigen Bloch-Funktionen [Hou]. Ein anderer Zugang verwendet lokalisierte Zustände und ersetzt das Übergitter dann durch eine große Anzahl von Quantentöpfen. Zum einen wird dann das Problem numerisch angegangen [McI, Barr, jLeo88, Bru, Lea], zum anderen führt der Formalismus starker Bindung (tight-binding approach) auf ein einfaches, aber sehr intuitives Bild der Wannier-Stark-Lokalisation [Kaz, Ble, Mov, jLeo89, Yan, Mei00]. Dabei verwendet man als Basis-Funktionen die Lösungen des isolierten Quantentopfes und beschränkt die Kopplung nur auf die nächsten Nachbarn. Die Folge ist eine analytische Lösung. Wie gleich der direkte Vergleich zeigen wird, ist die Basis der Wannier-Funktionen letzterem Zugang sehr ähnlich, in der Näherung aber weniger brutal. Das resultiert allerdings darin, dass eine analytische Lösung nicht gelingt. Da die Wannier-Funktionen aber auch eng mit den Bloch-Funktionen verknüpft sind, stellt ihre Benutzung eine Hybridisierung der beiden Zugänge dar.

Vereinbart man für die Indizierung folgende Konventionen: Die aus dem zugrunde liegenden Kristallgitter herrührenden Bänder, also im absteckten Rahmen des Zweiband-Halbleitermodells, Elektronen und Löcher, bezeichnen α und β ; den aufgrund des Übergitters entstehenden Minibänder sind hingegen μ und ν vorbehalten, während in k sowohl die Komponenten parallel und senkrecht zu den Übergitterschichten enthalten sind: $k = (\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp})$ und i und j die Lokalisierung der einzelnen Töpfe indiziert; so sind die Wannier-Funktionen ($w_{\alpha\mu}(x - R_i)$) durch die Bloch-Funktionen ($\psi_{\alpha\mu k_{\perp}}(x)$) wie folgt definiert:

$$w_{\alpha\mu}(x - R_i) = \frac{1}{\sqrt{LN}} \sum_{k_{\perp}} e^{-ik_{\perp} R_i} \psi_{\alpha\mu k_{\perp}}(x) \quad (\text{C.1})$$

Die Transformation beschränkt sich auf die eine Dimension des Übergitter, in den Schichtebenen werden im Rahmen der Einhüllenden-Näherung ebene Wellen beibehalten (Quantenzahl $\vec{k}_{||}$) Pflanz man die Symmetrien der räumlichen und zeitlichen Inversion zur Bestimmung der in den Bloch-Funktionen unbestimmten Phase ein, so erntet man in den Wannier-Funktionen, dass sie reell sind, schnell abfallen (starke Lokalisation) und den Symmetrien der Minibänder folgen. Obwohl es sich bei den Wannier-Funktionen um Eigenfunktionen nicht einmal eines Teilsystems handelt, also nicht einmal ein Teil des Hamilton-Operators diagonalisiert ist, sind durch die Verwandtschaft mit den Bloch-Funktionen die Nichtdiagonalelemente aufgrund des Übergitters gut im Griff. Da die Wannier-Funktionen lokalisiert sind, den Nichtdiagonalelementen bezüglich des Übergitterpotenzials also die Vermittlung zwischen unterschiedlichen räumlichen Punkten der jeweiligen Lokalisierung zukommt, hat sich aus dem Englischen der Name „Hopping-Terme“ eingebürgert. Das Hopping-Matrixelement ergibt sich sofort aus dem Diagonalanteil in den Bloch-Funktionen, der Minibanddispersion $\epsilon(k_{\perp})$, zu

$$H_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{k_{\perp}} \epsilon(k_{\perp}) e^{ik_{\perp}(R_i - R_j)} \quad . \quad (C.2)$$

Man sieht sofort, dass die Diagonalelemente die mittlere Bandenergie wiedergeben. Mit der Fourier-Entwicklung der Banddispersion — wie sie für die hier verwendeten Parameter (siehe Abschn. 5) sehr rasch konvergiert (siehe Abschn. 5.3) — lassen sich die Hopping-Matrixelemente analytisch berechnen. Für die Matrixelemente des elektrischen Feldes wird die Lokalisierung dazu führen, dass nur benachbarte Lokalisationen miteinander nennenswert gekoppelt sind (im Extremfall nur eine nächste Nachbar-Kopplung). Dass die Wannier-Funktionen für die verwendeten Parameter stark lokalisiert sind, zeigt der Vergleich mit den Eigenfunktionen des isolierten Quantentopfes gleicher Abmessungen in Abbildung C.1. Abstrakt führt das elektrische Feld in der Wannier-Basis zu folgenden Ausdrücken:

$$-e\mathcal{E} \int dx w_{\mu}(x - R_i) x w_{\nu}(x - R_j) = -e\mathcal{E} T_{\mu\nu ij} - e\mathcal{E} \frac{R_i + R_j}{2} \delta_{i,j} \delta_{\mu\nu} \quad (C.3)$$

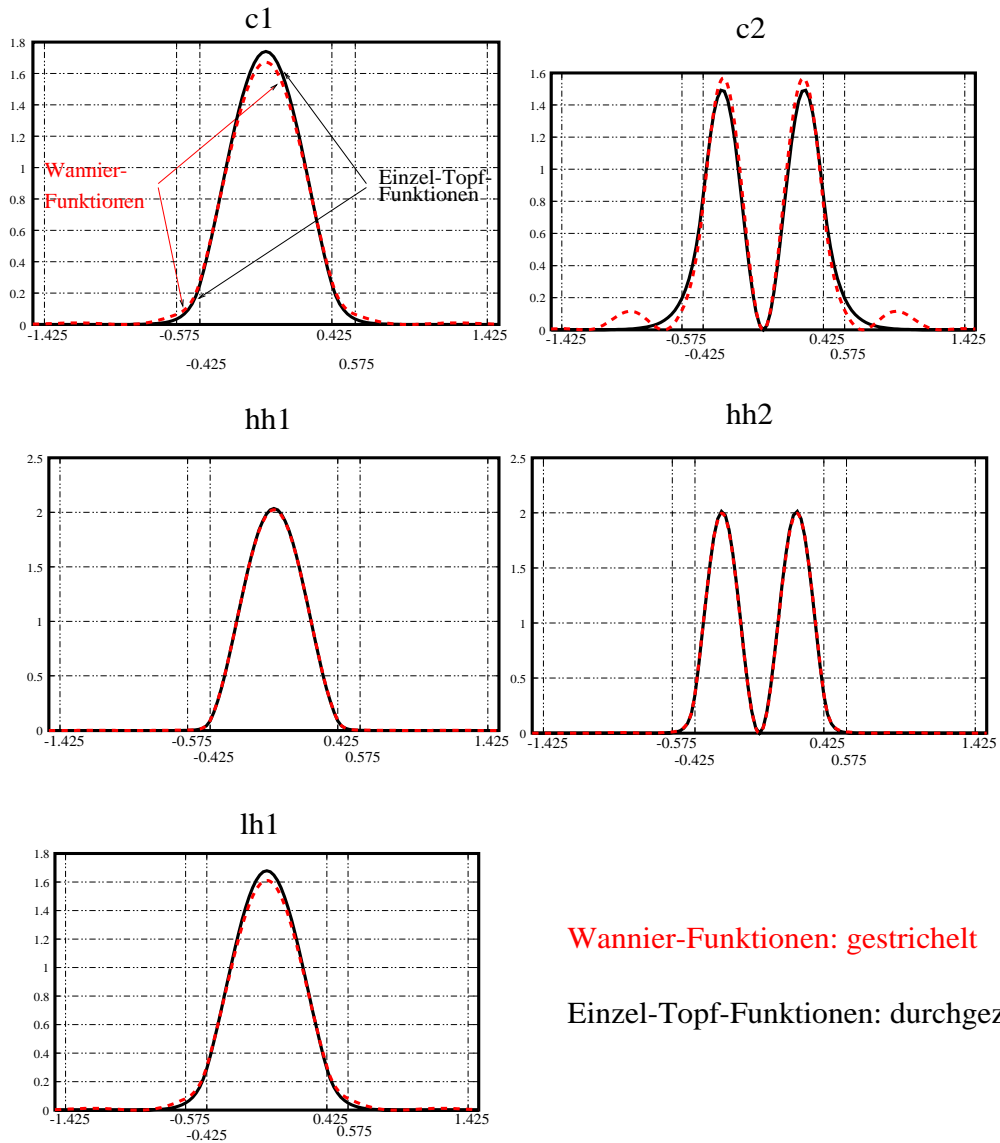
mit

$$T_{\mu\nu ij} = \int dx w_{\mu}(x - R_i) \left(x - \frac{R_i + R_j}{2} \right) w_{\nu}(x - R_j) \quad . \quad (C.4)$$

Ohne Kenntnis der Wannier-Funktion genügen reine Symmetriebetrachtungen, um zu zeigen, dass gilt

$$T_{\mu\mu lm} = T_{\mu\mu lm} \delta_{lm} \quad . \quad (C.5)$$

Damit ist aber auch sofort klar, was es mit der Aufteilung des Matrixelementes des elektrischen Feldes auf sich hat: während $e\mathcal{E} \frac{R_i + R_j}{2} \delta_{i,j} \delta_{\mu\nu}$ die Drift im Miniband be-



Wannier-Funktionen: gestrichelt

Einzel-Topf-Funktionen: durchgezogen

Abbildung C.1: Vergleich zwischen den Wannier-Funktionen (rot, gestrichelt) und den Eigenfunktionen des isolierten Quantentopfes (schwarz, durchgezogen) für die niedrigsten Minibänder (Absolutquadrat); die Ortskoordinate ist in Einheiten der Periodenlänge $l = 11.4 \text{ nm}$ angegeben, die Vertikalen markieren Topf- bzw. Barriereränder

schreibt, verursachen die T -Anteile das Miniband-Tunneln.

Die konkrete Auswertung zeigt tatsächlich, dass die Berücksichtigung einiger weniger benachbarter Lokalisationen ausreichend ist (siehe Abb. C.2 und C.3).

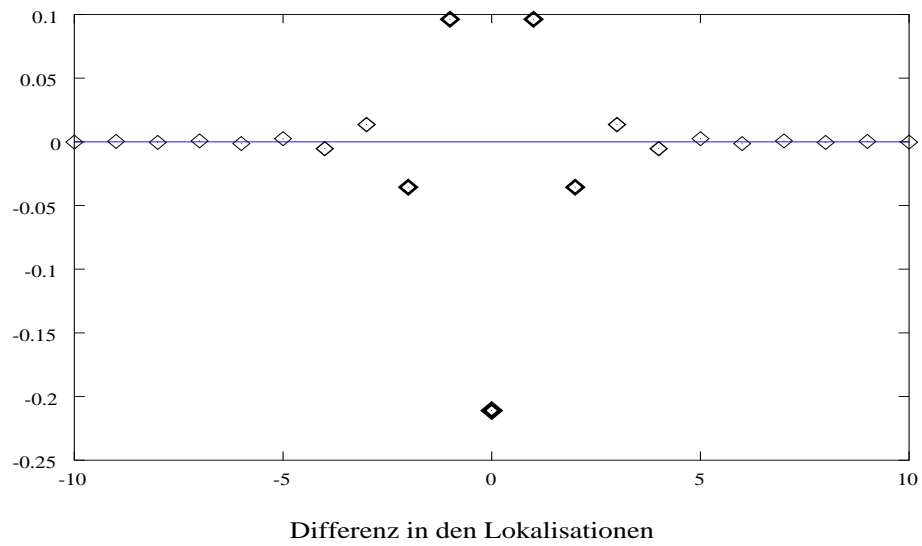


Abbildung C.2: Durch das elektrische Feld verursachte Matrixelemente zwischen dem ersten und dem zweiten Miniband der Leitungselektronen: Wannier-Basis

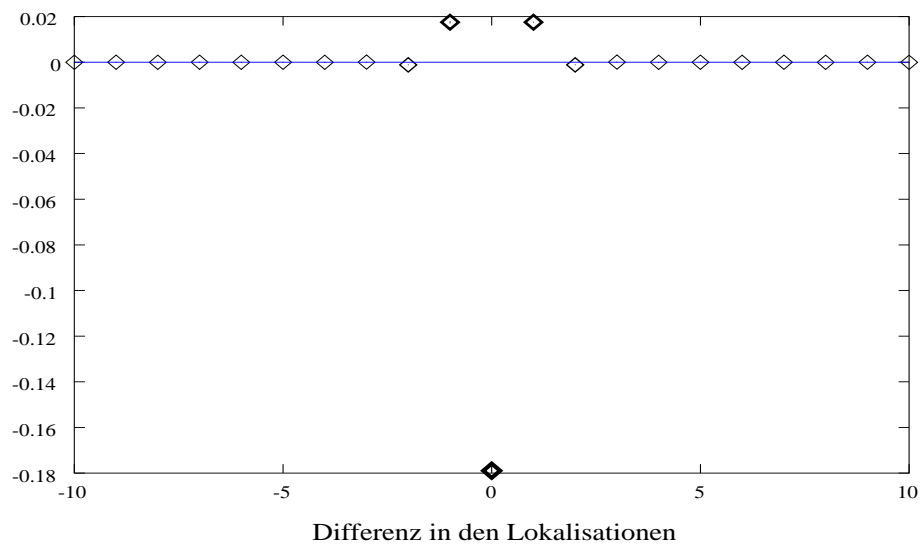


Abbildung C.3: Durch das elektrische Feld verursachte Matrixelemente zwischen dem ersten und dem zweiten Miniband der schweren Löcher: Wannier-Basis

Im Gegensatz dazu muß in der k -Darstellung die gesamte Brillouin-Zone ausgewertet werden (siehe Abb. C.4 und C.5).

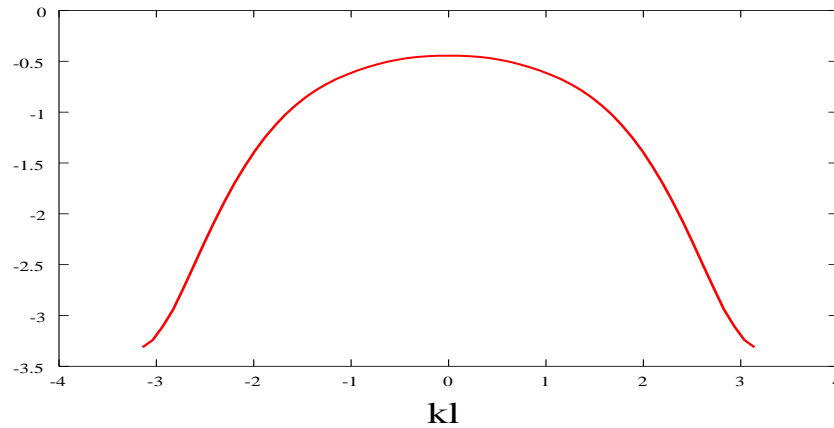


Abbildung C.4: Durch das elektrische Feld verursachte Matrixelemente zwischen dem ersten und dem zweiten Miniband der Leitungselektronen: k -Basis

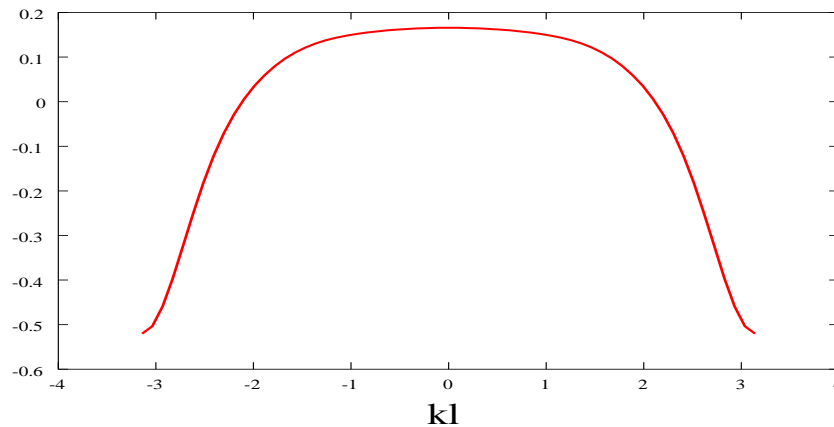


Abbildung C.5: Durch das elektrische Feld verursachte Matrixelemente zwischen dem ersten und dem zweiten Miniband der schweren Löcher: k -Basis

In allen Fällen muss noch mit $e\mathcal{E}$ multipliziert werden. Da die Matrixelemente in Einheiten der Periodenlänge geschrieben sind, ist der Faktor $11.4 \times \mathcal{E}$ [kV/cm], um meV zu erhalten. Zahlenspiele für elektrische Feldstärken weisen in die gleiche Richtung wie die neuesten Ergebnisse theoretischer und experimenteller Art [Glu99, Glu00, Rosa99, Rosa00, Rosa], die für hohe Felder das Zener-Tunneln voraussagen bzw. den Zusammenbruch der Wannier-Stark-Resonanzen beobachten.

Abschließend stellen wir formal die Bewegungsgleichungen in den beiden Basen (k -Darstellung/Wannier-Darstellung) gegenüber.

In der lokalisierten, der Wannier-Basis tragen die Dichtematrixelemente $\rho_{\beta'\mu'j',\beta\mu j,k} = \langle a_{\beta\mu j,k}^\dagger a_{\beta'\mu'j',k} \rangle$ die Indizierung des \vec{k} -Vektors: $k = \vec{k}_\parallel$, $q = \vec{q}_\parallel$ parallel zu den Gitterstrukturschichten, die der Bänder α, β (Elektron/Löcher) und in jedem der Minibänder μ, ν die Quantenzahl der Lokalisation i, j . Die Bewegungsgleichungen lauten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\beta'\mu'j',\beta\mu j,k} = & -\frac{i}{\hbar} \left[\sum_i \left(\tilde{H}_{\beta',\mu',j'i,k} \rho_{\beta'\mu'i,\beta\mu j,k} - \tilde{H}_{\beta,\mu,i j,k} \rho_{\beta'\mu'j,\beta\mu i',k} \right) \right. \\ & - \sum_{\alpha\nu i} \left(\Omega_{\alpha\nu i,\beta\mu j,k} \rho_{\beta'\mu'j',\alpha\nu i,k} - \Omega_{\beta'\mu'j',\alpha\nu i,k} \rho_{\alpha\nu i,\beta\mu j,k} \right) \\ & + \sum_{ii'iii'\nu'\nu''\nu'''\nu''''q} \left((1 - \delta_{\nu'\mu}) W_{\nu'i'k,\nu''i''q,\mu'jk,\nu''''i''''q}^{\beta\beta} \rho_{\beta'\mu'j',\beta\nu'i',k} \rho_{\beta\nu''''i'''',\beta\nu''i''q} \right. \\ & \quad \left. - (1 - \delta_{\nu'\mu'}) W_{\mu'j'k,\nu''i''q,\nu'i'k,\nu''''i''''q}^{\beta'\beta'} \rho_{\beta'\nu'i',\beta\mu j,k} \rho_{\beta'\nu''''i'''',\beta'\nu''i''q} \right) \\ & - e\mathcal{E} \sum_{\nu i} \left(T_{\beta',\mu'j',\nu i,k} \rho_{\beta'\nu i,\beta\mu j,k} - T_{\beta,\nu i,\mu j,k} \rho_{\beta'\mu'j',\beta\nu i,k} \right) \\ & \left. - ie\mathcal{E}(R_j - R_{j'}) \rho_{\beta'\mu'j',\beta\mu j,k} \right] . \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Dabei renormieren die Hartree-Fock-Terme sowohl die Hopping-Matrixelemente

$$\tilde{H}_{\beta',\mu',j'i,k} = H_{\beta',\mu',j'i,k} - \sum_{\nu''\nu''''i''i''''q} W_{\mu'j'k,\nu''i''q,\mu'ik,\nu''''i''''q}^{\beta'\beta'} \rho_{\beta'\nu''''i'''',\beta'\nu''i''q} \quad (\text{C.7})$$

als auch die Rabi-Frequenzen

$$\Omega_{\beta'\mu'j',\alpha\nu i,k} = d_{\beta'\mu'j',\alpha\nu i,k} E(t) - \sum_{\nu''\nu''''i''i''''q} W_{\mu'j'k,\nu''i''q,\nu'ik,\nu''''i''''q}^{\beta'\alpha} \rho_{\beta'\nu''''i'''',\alpha\nu''i''q} (1 - \delta_{\beta'\alpha}) \quad (\text{C.8})$$

In der ersten Zeile tragen die Hopping-Matrixelemente den Energien in der Effektive-Masse-Näherung sowie der Übergitterstruktur Rechnung, die in der Kopplung des optischen Feldes auftretenden Rabi-Frequenzen sind in der zweiten Zeile zu finden. Beide Beiträge werden durch die Coulomb-Wechselwirkung auf der Hartree-Fock-Ebene renormiert. Was von dieser Wechselwirkung im mittleren Feld bisher noch nicht berücksichtigt ist, füllt die Zeilen drei und vier (Hartree-Fock-Terme wurden hier nicht im Detail ausgearbeitet). Zeilen fünf und sechs sind für die Kopplung des elektrischen Feldes reserviert, wobei erstere das Tunneln zwischen den Bändern beschreibt, während zweitere den Feld-induzierten Übergängen zwischen den Lokalisationen vorbehalten bleibt.

In der k -Basis sind die Lokalisation i, j nicht vorhanden, stattdessen ist der $k = (\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp})$ nun dreidimensional zu verstehen: ein zweidimensionaler Vektor \vec{k}_{\parallel} in den Gitterstrukturschichten und einen für die Minibänder μ, ν spezifischen Kristallimpuls k_{\perp} . Damit haben die Bewegungsgleichungen die Form:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\beta' \mu', \beta \mu, k} = & -\frac{i}{\hbar} \left[((\tilde{\epsilon}_{\beta', \mu', k} - \tilde{\epsilon}_{\beta, \mu, k}) \quad \rho_{\beta' \mu', \beta \mu, k}) \right. \\
& - \sum_{\alpha \nu} (\Omega_{\alpha \nu, \beta \mu, k} \quad \rho_{\beta' \mu', \alpha \nu, k} - \Omega_{\beta' \mu', \alpha \nu, k} \quad \rho_{\alpha \nu, \beta \mu, k}) \\
& + \sum_{\nu' \nu'' \nu''' q} \left((1 - \delta_{\nu' \mu}) W_{\nu' k, \nu'' q, \mu k, \nu''' q}^{\beta \beta} \rho_{\beta' \mu', \beta \nu', k} \rho_{\beta \nu''', \beta \nu'', q} \right. \\
& \quad \left. - (1 - \delta_{\nu' \mu'}) W_{\mu' k, \nu'' q, \nu' k, \nu''' q}^{\beta' \beta'} \rho_{\beta' \nu', \beta \mu, k} \rho_{\beta' \nu''', \beta' \nu'', q} \right) \\
& - e \mathcal{E} \sum_{\nu} (X_{\beta, \nu \mu, k} \quad \rho_{\beta' \nu, \beta \mu', k} - X_{\beta', \mu' \nu, k} \quad \rho_{\beta' \nu', \beta \mu, k}) \\
& \left. - i e \mathcal{E} \frac{\partial}{\partial k_{\perp}} \quad \rho_{\beta' \mu', \beta \mu, k} \right] . \tag{C.9}
\end{aligned}$$

Anstatt der Hopping-Matrixelemente sind nun die Ein-Teilchen-Energien durch die Hartree-Fock-Term renormiert (erste Zeile)

$$\tilde{\epsilon}_{\beta', \mu', k} = \epsilon_{\beta', \mu', k} - \sum_{\nu'' \nu''' q} W_{\mu' k, \nu'' q, \mu' k, \nu''' q}^{\beta' \beta'} \rho_{\beta' \nu''', \beta' \nu'', q} \tag{C.10}$$

als auch wiederum die Rabi-Frequenzen in der zweiten Zeile

$$\Omega_{\beta' \alpha \mu' \nu k} = d_{\beta' \alpha \mu' \nu k} E(t) - \sum_{\nu'' \nu''' q} W_{\mu' k, \nu'' q, \nu k, \nu''' q}^{\beta' \alpha} \rho_{\beta' \alpha \nu'' \nu''' q} (1 - \delta_{\beta' \alpha}) . \tag{C.11}$$

Und auch für die restlichen Terme zeigt sich — bei anderer Indizierung und unterschiedlicher konkreter Form der Matrixelemente — die gleiche Struktur: Zeile drei und vier beinhalten die restlichen Coulomb-Terme, die fünfte Zeile zeigt die Feld-induzierten Tunnelterme und in der letzten Zeile steht der Driftterm innerhalb der Bänder.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Anwendungsmöglichkeiten der THz-Technologie [Zha98]	3
2.1	Bandstruktur Gallium-Arsenid, qualitativ	12
2.2	Skalenvielfalt: Supergitter, räumliche Darstellung (makroskopisch); Heterostruktur, idealisierte Energieverhältnisse (mesoskopisch); Kristallstruktur, stark idealisiert (mikroskopisch)	13
2.3	Szenario im asymmetrischen Doppelquantentopf (links); räumliche Oszillationen eines Wellenpaketes (rechts)	21
2.4	THz-Antennen-Spektroskopie	23
2.5	Elektro-Optische Detektion [Zha98]	23
3.1	Zeitliche Evolution der Koordinate für Elektronen und leichte Löcher; ohne Dämpfung (links), gedämpft (rechts)	29
3.2	Zeitliche Evolution des Stromes in x -Richtung; Elektron (gestrichelt), Loch (gepunktet), Summe (durchgezogen); ohne Dämpfung (links), gedämpft (rechts)	31
3.3	Parametrische Evolution des Stromes; Elektron (oben), Loch (unten); ohne Dämpfung (links), gedämpft (rechts)	31
3.4	Spektrum in gekreuzten magnetischen und elektrischen Feldern (rechts) im Vergleich zu dem freier Teilchen (links)	33
3.5	Spektrum der optischen Absorption aufgetragen gegen die Energie über der unrenomierten Bandkante und gegen das elektrische Feld für $\mathcal{B} = 4$ T	35
3.6	Inverse transversale Relaxationszeit τ_{n,k_z}^e für die Elektron in verschiedenen Landau-Niveaus gegen $E_{kin} = \hbar^2 k_z^2 / 2m_e$; $\mathcal{B} = 6$ T; $\mathcal{E} = 4$ kV/cm (oben); $\mathcal{E} = 6$ kV/cm (unten)	39
3.7	Inverse transversale Relaxationszeit $\tau_{4,0}^e$ für Elektronen aufgetragen gegen magnetisches und elektrisches Feld	41

3.8	Lokale Zustandsdichte für verschiedene magnetische Feldstärken ($\mathcal{B} = 2, 8, 20$ T), $\mathcal{E} = 4$ kV/cm; sowie für die beiden Grenzfälle ohne elektrisches bzw. magnetisches Feld	43
3.9	Schwellenverhalten: Lokale Zustandsdichte und inverse Lebensdauern (verschoben um ihre Landau-Niveau-Energien); $\mathcal{E} = 4$ kV/cm, $\mathcal{B} = 6$ T	44
3.10	Zeitliche Evolution des Stromes für verschiedene elektrische Felder \mathcal{E} (kV/cm). x -Komponente; $\mathcal{E} = 0.5$ (kV/cm) gepunktet, $\mathcal{E} = 3$ (kV/cm) gestrichelt, $\mathcal{E} = 5.5$ (kV/cm) durchgezogen; $\mathcal{B} = 4$ T.	51
3.11	Zeitliche Evolution des Stromes aufgetragen gegen die Verstimmung Δ ; $\mathcal{E} = 4$ kV/cm, $\mathcal{B} = 4$ T; x -Komponente	52
3.12	Spektrum der des Stromes aufgetragen gegen die Verstimmung Δ ; $\mathcal{E} = 4$ kV/cm, $\mathcal{B} = 4$ T, x -Komponente	53
3.13	Zeitlich integriertes Amplitudenquadrat der Ableitung des Stromes als Funktion der Verstimmung Δ ; $\mathcal{E} = 4$ kV/cm, $\mathcal{B} = 4$ T	54
4.1	Vergleich des summierten effektiven Potentials (in Einheiten von $1/a$, willkürlicher Ursprung) für verschiedene Elektrongitterkonstanten R (in Einheiten von a): $R = 225$ Strich-Punkt-Punkt, $R = 30$ Strich-Punkt, $R = 20$ gestrichelt, $R = 6.28$ durchgezogene Linie	66
4.2	Vergleich des summierten effektiven Potentials (in Einheiten von $1/a$; willkürlicher Ursprung) (durchgezogene Linie) mit einer Nächsten-Nachbar-Näherung (gestrichelte Linie): oben $R = 225$, Mitte $R = 20$, unten $R = 6.28$ (R in Einheiten von a)	67
4.3	Diffusives Regime, freies Elektron (gepunktet), Einteilchen (gestrichelt), Vielteilchen (durchgezogen)	69
4.4	Ballistisches Regime, freies Elektron (gepunktet), Einteilchen (gestrichelt), Vielteilchen (durchgezogen)	71
4.5	Kritischer Bereich, freies Elektron (gepunktet), Einteilchen (gestrichelt), Vielteilchen (durchgezogen)	72
4.6	Verschiedene Ausrichtungen des elektrischen Feldes hinsichtlich des Elektrongitters, Bewegung entlang der Achse (gepunktet), nahe der Volumendiagonalen (gestrichelt), nahe der Oberflächendiagonalen (durchgezogen)	73
4.7	Fourier-Transformation der Beschleunigung, nahe der Oberflächendiagonalen (durchgezogen), nahe der Volumendiagonalen (gestrichelt) . .	75
4.8	Streuung im Winkel zwischen elektrischem Feld und der Koordinate, nahe der Oberflächendiagonalen (durchgezogen), nahe der Volumendiagonalen (gestrichelt)	75

4.9	Verschiedene Richtungen der Anfangsgeschwindigkeiten, In-Feld-Richtung (durchgezogen), keine Anfangsgeschwindigkeit (gestrichelt), Gegen-Feld-Richtung (Strich-Punkt), senkrecht zum Feld (Strich-Punkt-Punkt) . . .	77
4.10	Fourier-transformiertes Signal (Beschleunigung); Anfangsgeschwindigkeit in Feldrichtung (durchgezogen); keine Anfangsgeschwindigkeit (gestrichelt)	78
4.11	Polariton-Spektrum (schematisch)	80
5.1	Bloch-Oszillationen. Dynamik eines zur Zeit t_0 an der unteren Bandkante erzeugten Wellenpaketes. Bewegung des Wellenpaketes im k -Raum entlang der Dispersionskurve (Gl.5.3, unten links); im Ortsraum innerhalb der Lokalisierungslänge (Gl. 5.7, unten rechts); lineare zeitliche Evolution des Schwerpunktes des Wellenpaketes in der Brillouin-Zone (Gl. 5.2, oben links); Oszillation des Wellenpaketschwerpunktes im Ortsraum (Gl. 5.6, oben rechts); siehe [Mei00]	84
5.2	Bandstruktur ohne elektrisches Feld: ausgedehnte Bloch-Funktionen; durch das elektrische Feld verkippte Bandstruktur: diskrete lokalisierte Zustände (schematisch)	86
5.3	Bloch-Oszillationen im Wannier-Stark-Bild, analog zum Drei-Niveau-System	87
5.4	Experimentelle Wannier-Stark-Leiter [Hum99]	88
5.5	Geometrie des Übergittermodells	90
5.6	Stromdichte in Abhängigkeit der Anregung Verstimmung/Minibandbreite-Verhältnisse α : in aufsteigender Strichunterbrechung und von schwarz über blau nach rot: $\alpha = 0, 0.15, 0.35, 0.45, 0.5, 1$ (eindimensional) . . .	92
5.7	Teilchendichte in Abhängigkeit des Verstimmung/Minibandbreite-Verhältnisse α : in aufsteigender Strichunterbrechung und von schwarz über blau nach rot: $\alpha = 0; 0.15; 0.35; 0.45; 0.5; 1$ (eindimensional)	93
5.8	Illustration der atmenden Mode im k -Raum (links) und im Ortsraum (rechts) $t = 0$ rot, $t = T_{BO}/4 = 2\pi/(\omega_{BO}4)$ braun	94
5.9	Das Kronig-Penney-Potenzial	95
5.10	Die Minibänder der Elektronen in einem GaAs/Ga _{0.7} Al _{0.3} As Übergitter. ($V_0 = 224$ meV, $a = 9.7$ nm, $b = 1.7$ nm)	97
5.11	Fit der ersten zwei Minibänder (Leitungselektronen) durch eine Fourier-Entwicklung	97

5.12	Die Minibänder der Elektronen in einem GaAs/Ga _{0.7} Al _{0.3} As Übergitter ($V_0 = 224$ meV, $a = 9.7$ nm, $b = 1.7$ nm) im Vergleich mit dem parabolischen Spektrum eines freien Teilchens (gestrichelt, rot) und den diskreten Energieeigenwerten eines isolierten Quantentopfes (gepunktet, blau)	98
5.13	Loch-Miniband-Struktur im Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	102
5.14	Loch-Miniband-Struktur im Unterraum $J_z = \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$	102
5.15	Identifikation der Minibänder bei $k_{ } = 0$	103
5.16	Bandkreuzung und Bandabstoßung des zweiten und dritten Minibandes im Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$; Bandkreuzung bei $k_{ } = 0$ (oben); Bandabstoßung $k_{ } = 0.1\frac{\pi}{l}$ (unten). Die Symbole repräsentieren die numerischen Daten, die Linien sind Fits.	104
5.17	Dispersion in der Ebene im Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$ bei $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \frac{\pi}{l}$	105
5.18	Dispersion in der Ebene im Unterraum $J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$ bei $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \frac{\pi}{l}$	105
B.1	Absorption als Funktion der Energie und der Amplitude des Wechselfeldes \mathcal{E}_t , $\mathcal{E} = 4$ kV/cm, $\mathcal{B} = 4$ T	114
C.1	Vergleich zwischen den Wannier-Funktionen (rot, gestrichelt) und den Eigenfunktionen des isolierten Quantentopfes (schwarz, durchgezogen) für die niedrigsten Minibänder (Absolutquadrat); die Ortskoordinate ist in Einheiten der Periodenlänge $l = 11.4$ nm angegeben, die Vertikalen markieren Topf- bzw. Barriere-Ränder	117
C.2	Durch das elektrische Feld verursachte Matrixelemente zwischen dem ersten und dem zweiten Miniband der Leitungselektronen: Wannier-Basis	118
C.3	Durch das elektrische Feld verursachte Matrixelemente zwischen dem ersten und dem zweiten Miniband der schweren Löcher: Wannier-Basis	118
C.4	Durch das elektrische Feld verursachte Matrixelemente zwischen dem ersten und dem zweiten Miniband der Leitungselektronen: k -Basis . .	119
C.5	Durch das elektrische Feld verursachte Matrixelemente zwischen dem ersten und dem zweiten Miniband der schweren Löcher: k -Basis . . .	119

Literaturverzeichnis

- [Agu] **F. Agulló-Rueda** and **J. Feldmann**, *Wannier-Stark Localisation and Bloch Oscillations* in: *Semiconductor Superlattices Growth and Electronic Properties*, Ed. H.T. Grahn, World Scientific, Singapore (1995), p. 99
- [Alt83/1] **M. Altarelli**, Phys. Rev. **B 28**, 842 (1983)
- [Alt83/2] **M. Altarelli**, Physica **B 117 & 118** , 747 (1983)
- [Alt85] **M. Altarelli**, **U. Ekenberg**, and **A. Fasolino**, Phys. Rev. **B 32**, 5138 (1985)
- [Alt86] **M. Altarelli**, *Semiconductor Superlattices and Heterojunctions* Ed. G. Allen, G. Bastard, N. Boccarda, M. Lannoo, and M. Voss, Springer, Berlin (1986), p. 12
- [And] **L.C. Andreani**, **A. Pasquarello**, and **F. Bassani**, Phys. Rev. **B 36**, 5887 (1987)
- [Ans] **A.I. Anselm**, *Einführung in die Halbleitertheorie*, Akademie Verlag, Berlin (1964)
- [Arg] **P.N. Argyres**, Phys. Rev. **126**, 1386 (1962)
- [Ash] **N.W. Ashcroft** and **N.D. Mermin**, *Solid State Physics*, Academic Press, Boston (1985)
- [Aus] **D. Auston**, **K. Cheung**, and **P. Smith**, Appl. Phys. Lett. **45**, 284 (1984)
- [Ban93] **L. Bányai**, Phys. Rev. Lett. **70**, 1674 (1993)

- [Ban95] **L. Bányai**, *Motion of the Classical Polaron in Microscopic Theory of Semiconductors in Quantum Kinetics, Confinement and Lasers*, Ed. S.W. Koch, World Scientific, Singapore (1995), p. 283
- [Ban98] **L. Bányai, Q.T. Vu, B. Mieck, and H. Haug**, Phys. Rev. Lett. **81**, 882 (1998)
- [Ban00] **L. Bányai, P. Gartner, O.M. Schmitt, and H. Haug**, Phys. Rev. B **61**, 8823 (2000)
- [Bak] **P. Bakshi, K. Kempa, A. Scorupsky, C.G. Du, G. Feng, R. Zobl, G. Strasser, C. Rauch, Ch. Pacher, K. Unterrainer, and E. Gornik**, Appl. Phys. Lett. **75**, 1685 (1999)
- [Barn] **D.J. Barnes, R.J. Nicolas, F.M. Peeters, X.-G. Wu, J.T. Devreese, J. Singleton, C.J.G.M. Langerak, J.J. Harris, and C.T. Foxon**, Phys. Rev. Lett. **66**, 794 (1991)
- [Barr] **J. Barrau, K. Khirouni, D.X. Than, T. Amand, M. Brouseau, F. Laruelle, and B. Etienne**, Solid State Commun. **74**, 147 (1990)
- [Bass] **F. Bassani and G.P. Parravicini**, *Electronic States and Optical Transitions in Solids*, Pergamon Press, Oxford (1975)
- [Bast88] **G. Bastard**, *Wave mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique, Paris (1988)
- [Bast89] **G. Bastard and R. Ferreira**, in *Spectroscopy of Semiconductor Microstructures*, Vol. 206 of NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics, Ed. G. Fasol and A. Fasolino, Plenum Press, New York (1989), p. 333
- [Bau] **T. Bauer und H.G. Roskos**, private Mitteilung
- [Ble] **J. Bleuse, G. Bastard, and P. Voisin**, Phys. Rev. Lett. **60**, 220 (1980)
- [Blo] **F. Bloch**, Z. Phys. **52**, 555 (1928)
- [Bon] **M. Bonitz**, *Quantum Kinetic Theory*, Teubner, Stuttgart (1998)
- [Bonv] **A. Bonvalet, M. Joffre, J.L. Martin, and A. Migus**, Appl. Phys. Lett. **67**, 2907 (1995)

- [Bor54] **M. Born** and **K. Huang**, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Clarendon Press, Oxford (1954)
- [Bra] **R. Bratschitsch**, **R. Kersting**, **T. Müller**, **G. Strasser**, **K. Unterrainer**, **W. Fischler**, and **R.A. Höpfel**, *Physica B* **272**, 375 (1999)
- [Bru] **J.A. Brum** and **F. Agulló-Rueda**, *Surf Sci* **229**, 472 (1990)
- [Bub] **R.H. Bube**, *Photoelectronic Properties of Semiconductors*, Cambridge University press, Boston (1992)
- [Cal] **J. Callaway**, *Quantum Theory of the Solid State*, Academic Press, Boston (1991)
- [Cap] **D. Sivco**, **A. Cho**, **A. Hutchinson**, **C. Gmachl**, **A. Tredicucci**, and **F. Capasso**, Bell Laboratories, Lucent Technologies <http://www.bell-labs.com/org/physicalsciences/projects/qcl/qcl1.html>
- [Che] **D. Chemla**, **D. Miller**, and **S. Schmitt-Rink**, *Phys. Rev. Lett* **59**, 1018 (1987)
- [Chev] **R. Cheville** and **D. Grischkowsky**, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 1960 (1995)
- [Cho] **G.C Cho**, **W. Kütt**, and **H. Kurz**, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 764 (1990)
- [Chu] **S.L. Chuang**, **S. Schmitt-Rink**, **B.J. Greene**, **P.N. Saeta**, and **A.F.J. Levi**, *Phys. Rev. Lett.* **68** 102 (1992)
- [Dah] **M.B. Dahan**, **E. Peik**, **J. Reichel**, **Y. Castin**, and **Ch. Salomon**, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4508 (1996)
- [Dek] **T. Dekorsy**, **H. Auer**, **C. Waschke**, **H.J. Bakker**, **H.G. Roskos**, and **H. Kurz**, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 738 (1995)
- [Dem] **W. Demtröder**, *Laser Spectroscopy* Springer, Berlin (1996)
- [Dev] **B. Deveaud**, **A. Chomette**, **F. Clérot**, **A. Regreny**, **J.C. Maan**, **R. Romestain**, **G. Bastard**, **H. Chu**, and **Y.-Ch. Chang**, *Phys. Rev. B* **40**, 5802 (1989)
- [Dig90] **M. Dignam** and **J.E. Sipe**, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1797 (1990)
- [Dig94] **M. Dignam**, **J.E. Sipe**, and **J. Shah**, *Phys. Rev. B* **49**, 10502 (1994)

- [Dun] **D.H. Dunlap** and **V.M. Kenkre**, Phys. Rev. B **34**, 3525 (1986)
- [Ehr] **S. Ehret** and **H. Schneider**, Appl. Phys. B **66**, 27 (1998)
- [Esa] **L. Esaki** and **R. Tsu**, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970)
- [Fai94] **J. Faist** and **F. Capasso**, Science **264**, 553 (1994)
- [Fai96] **J. Faist**, **F. Capasso**, **C. Sirtori**, **D.L. Sivco**, **J.N. Baillargeon**,
A.L. Hutchinson, **S.N.G. Chu**, and **A.Y. Cho**, Appl. Phys. Lett.
68, 3680 (1996)
- [Fel] **J. Feldmann**, **K. Leo**, **J. Shah**, **D.A.B. Miller**, **J.E. Cunningham**,
S. Schmitt-Rink, **T. Meier**, **G. von Plessen**, **A. Schulze**,
and **P. Thomas**, Phys. Rev. B **46**, 7252 (1992)
- [Fer] **D.K. Ferry**, *Semiconductors*, Macmillan Publishing Company, New
York (1991)
- [Flü] **S. Flügge**, *Practical Quantum Mechanics I* Springer, Berlin (1971)
- [Fra] **W. Franz**, Z. Naturforsch. **13**, 484 (1958)
- [Ger] **L.G. Gerchikov**, **B.D. Oskotsky**, and **A.V. Subashiev**, Phys. Rev.
B **50**, 15416 (1994)
- [Gho] **A.W. Ghosh** and **J.W. Wilkins**, Phys. Rev. B **61**, 5423 (2000)
- [Glu99] **S. Glutsch** and **F. Bechstedt**, Phys. Rev. B **60**, 16584 (1999)
- [Glu01] **S. Glutsch**, **F. Bechstedt**, **B. Rosam**, and **K. Leo**, Phys. Rev. B
63 085307 (2001)
- [Glu00] **S. Glutsch**, **F. Bechstedt**, **B. Rosam**, **F. Löser**, and **V. G. Lysenko**,
phys. stat. sol(a) **178**, 431 (2000)
- [Gor00/1] **E. Gornik** and **R. Kersting**, *Coherent THz Emission in Semiconductors*
in *Semiconductors and Semimetals, Vol. 67*, Ed. K.-T. Tsen,
Academic Press, London (2000), p. 389
- [Gor00/2] Publikationsliste Arbeitsgruppe **E. Gornik**, Wien,
<http://www.fke.tuwien.ac.at/publ.htm>

- [Had] **J. Hader, T. Meier, S.W. Koch, F. Rossi, and N. Linder**, Phys. Rev. B **55**, 13799 (1997)
- [Hai] **G.-Q. Hai and F.M. Peeters**, Phys. Rev. B **60**, 16513 (1999)
- [Hak] **H. Haken**, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, B.G. Teubner, Stuttgart (1993)
- [Hau94] **H. Haug and S.W. Koch** *Quantum theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific, Singapore (1994)
- [Hau96] **H. Haug and A.-P. Jauho**, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, Springer, Berlin, (1996)
- [Her] **M. Herbst, V.M. Axt, T. Kuhn, and J. Schilp**, phys. stat. sol. (b) **204**, 358 (1997)
- [Hol] **M. Holthaus**, Phys. Rev. Lett. **69**, 351 (1992)
- [Hou] **W.V. Houston**, Phys. Rev. **57**, 184 (1940)
- [Hu90] **B.B. Hu, J.T. Darrow, X.-C. Zhang, D.H. Auston, and P.R. Smith**, Appl. Phys. Lett. **56**, 886 (1990)
- [Hu91] **B.B. Hu, X.-C. Zhang, and D.H. Auston**, Phys. Rev. Lett **67**, 2709 (1991)
- [Hu94] **B.B. Hu, A.S. Weling, D.H. Auston, A.V. Kuznetsov, and C.J. Stanton**, Phys. Rev. B **49**, 2234 (1994)
- [Hu95/1] **B.B. Hu, E.A. de Souza, W.H. Knox, J.E. Cunningham, M.C. Nuss, A.V. Kuznetsov, and S.L. Chuang**, Phys. Rev. Lett. **74**, 1689 (1995)
- [Hu95/2] **B. Hu and M. Nuss**, Opt. Lett. **20**, 1716 (1995)
- [Hub00] **. R. Huber, A. Brodschelm, F. Tauser, and A. Leitenstorfer**, Appl. Phys. Lett. **76**, 1 (2000)
- [Hub01] **. R. Huber, F. Tauser, A. Brodschelm, and A. Leitenstorfer**, *Verhandlungen DPG Frühjahrstagung*, Hamburg, HL18.12, S. 189
- [Hugg] **P.G. Huggard, C.J. Shaw, S.R. Andrews, J.A. Cluff, and R. Grey**, Phys. Rev. Lett. **84**, 1023 (2000)

- [Hug] **S. Hughes** and **D.S. Citrin**, Phys. Rev. B **59**, R5288 (1999)
- [Hum99] **A.B. Hummel**, *Fotostromspektroskopie an GaAs/AsGaAs-Übergittern im magnetischen Feld*, Diplomarbeit, Frankfurt (1999)
- [Hum01] **A.B. Hummel**, **T. Bauer**, **H.G. Roskos**, **S. Glutsch**, and **K. Köhler**, in Vorbereitung
- [Ivc] **E.L. Ivchenko** and **G.E. Pikus**, *Superlattices and other Heterostructures*, Springer, Berlin, (1997)
- [Izu] **S. Izumida**, **S. Ono**, **Z. Liu**, **H. Ohtake**, and **N. Sarukura**, Appl. Phys. Lett. **75**, 451 (1999)
- [Jac] **J. Jackson**, *Classical Electrodynamics*, Wiley, New York (1998)
- [Jam] **H.M. James**, Phys. Rev. **76**, 1611 (1949)
- [Jan] **N. Janssen**, Doktorarbeit, Göttingen (1994)
- [Jau] **A.P. Jauho** and **K. Johnson**, Phys. Rev. Lett. **76**, 4576 (1996)
- [Joh] **K. Johnsen** and **A.P. Jauho**, Phys. Rev. B **57**, 8860 (1998)
- [Kai] **R.A. Kaindl**, **F. Eickemeyer**, **M. Woerner**, and **T. Elsaesser**, Appl. Phys. Lett. **75**, 1060 (1999)
- [Kan59] **E.O. Kane**, J. Phys. Chem. Solids **12**, 181, (1959)
- [Kan66] **E.O. Kane**, in *Semiconductors and Semimetals 1*, Ed. R.K. Willardson and A.C. Beer, Academic Press, New York (1966)
- [Kaz] **R.F. Kazarinov** and **R.A. Suris**, Sov. Phys. Semicond. **6**, 120 (1992)
- [Kea] **B.J. Keay**, **S. Zeuner**, **S.J. Allen**, **K.D. Maranowski**, **A.C. Gosard**, **U. Bhattacharya**, and **M.J.W. Rodwell**, Phys. Rev. Lett. **75**, 4102 (1995)
- [Kel] **L.V. Keldysh**, Sov. Phys. JETP **34**, 788 (1958)
- [Kem] **K. Kempa**, **P. Bakshi**, **C.G. Du**, **G. Feng**, **A. Scorupcky**, **G. Strasser**, **C. Rauch**, **K. Unterrainer**, and **E. Gornik**, J. Appl Phys. **85**, 3708 (1999)

- [Ker] **R. Kersting, K. Unterrainer, G. Strasser, H.F. Kaufmann, and E. Gornik**, Phys. Rev. Lett. **79**, 3038 (1997)
- [Kit] **C. Kittel**, *Quantum Theory of Solids*, Wiley, New York (1963)
- [Kop] **K. Kopitzki**, *Einführung in die Festkörperphysik*, Teubner, Stuttgart (1993)
- [Kra] **J.L. Krause and K.J. Schafer**, J. Phys. Chem A **103**, 10118 (1999)
- [Kri] **J.B. Krieger and G.J. Iafrate**, Phys. Rev B **33**, 5494 (1986)
- [Kro] **R. de L. Kronig and Penney**, Proc. Roy. Soc. A **130**, 499 (1930)
- [Kuh] **T. Kuhn**, *Ladungsträgerdynamik in Halbleitersystemen fern vom Gleichgewicht: Elektronisches Rauschen und kohärente Prozesse*, Habilitation, Shaker, Aachen (1994)
- [Küt92/1] **W. Kütt, G.C. Cho, T. Pfeiffer, and H. Kurz**, Semicond. Sci. Technol. **7**, b77 (1992)
- [Küt92/2] **W.A. Kütt, W. Albrecht, and H. Kurz**, IEEE Journal of Quantum Electronics **28**, 2434 (1992)
- [Kuz93] **A.V. Kuznetsov and C.J. Stanton**, Phys. Rev. B **48**, 10828 (1993)
- [Kuz95] **A.V. Kuznetsov and C.J. Stanton**, Phys. Rev. B **51** 7555 (1995)
- [LanII] **L.D. Landau and E.M. Lifschitz**, *Klassische Feldtheorie, Band II*, Akademie Verlag, Berlin (1992)
- [LanIII] **L.D. Landau and E.M. Lifschitz**, *Quantenmechanik, Band III*, Akademie Verlag, Berlin (1986)
- [LanIX] **L.D. Landau and E.M. Lifschitz**, *Quantenmechanik, Band IX*, Akademie Verlag, Berlin (1986)
- [Lando] **Landolt-Börnstein**, *Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaft und Technik, Gruppe 3: Condensed Matter, Band 17: Semiconductors, Subvolumen a: Physics of Group IV Elements and III-V Compounds*, Springer, Berlin (1982)
- [Lea] **Leavitt and J.W. Little**, Phys. Rev B **42**, 11784 (1990)

- [Leisch] **P. Leisching, C. Waschke, P. Haring Bolivar, W. Beck, H.G. Roskos, K. Leo, H. Kurz, K. Köhler, and P. Ganser**, in *Coherent Optical Interactions in Solids*, Ed. R. T. Philipps (Plenum, New York, 1994) p. 325
- [Lei99] **A. Leitenstorfer, S. Hunsche, J. Shah, M.C. Nuss, and W.H. Knox**, Phys. Rev. Lett. **82**, 5140 (1999)
- [Lei00] **A. Leitenstorfer, S. Hunsche, J. Shah, M.C. Nuss, and W.H. Knox**, Phys. Rev. B **61**, 16642 (2000)
- [jLeo88] **J. Leo and Movaghar**, Phys. Rev. b **38**, 8061 (1988)
- [jLeo89] **J. Leo and A. MacKinon**, J. Phys. C: Condens. Matter **1**, 1449 (1989)
- [kLeo91] **K. Leo, J. Shah, E.O. Göbel, T.C. Damen, S. Schmitt-Rink, W. Schäfer, and K. Köhler**, Phys. Rev. Lett. **66**, 201 (1991)
- [kLeo92] **K. Leo, P. Haring Bolivar, F. Brüggemann, R. Schwedler, and K. Köhler**, Solid State Commun. **84**, 934 (1992)
- [kLeo98] **K. Leo**, Semicond. Sci. Technol. **13**, 249 (1998)
- [Lin95] **N. Linder, K.H. Schmidt, W. Geiselbrecht, G.H. Döhler, H. T. Grahn, K. Ploog, and H. Schneider**, Phys. Rev. B **52**, 17352 (1995)
- [Lin97] **N. Linder**, Phys. Rev. B **55**, 13664 (1997)
- [Luo] **M.S.C. Luo, S.L. Chuang, P.C.M. Planken, I. Brener, H.G. Roskos, and M.C. Nuss**, IEEE Journal of Quantum Electronics **30**, 1478 (1994)
- [Lur] **S. Luryi**, IEEE Journal of Quantum Electronics **27**, 54 (1991)
- [Lut55] **J.M. Luttinger and M. Kohn**, Phys. Rev. **97**, 869 (1955)
- [Lut56] **J.M. Luttinger**, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956)
- [Lys97] **V.G. Lyssenko, G. Valusis, F. Löser, T. Hasche, K. Leo, M.M. Dignam, and K. Köhler**, Phys. Rev. Lett. **79**, 301 (1997)

- [Lys99] **V.G. Lyssenko, M. Sudzius, F. Löser, G. Valusis, T. Hasche, K. Leo, M.M. Dignam, and K. Köhler**, *Bloch Oscillations in Semiconductor Superlattices* in Festkörperprobleme/Advances in Solid State Physics **39** (1999), p. 225
- [Mad] **O. Madelung**, *Introduction to Solid State Theory*, Springer, Berlin (1978)
- [Mah] **G. Mahan**, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York (1981)
- [Mat] **A. Matulis and K. Piragas**, Fiz. Tekh. Poluprovodn. **9**, 220 (1975) [Sov. Phys. Semicond. **9**, 1432 (1976)]
- [May] **T. Mayer-Kuckuk**, *Atomphysik*, Teubner, Stuttgart (1997)
- [McD] **A.H. McDonald and D.S. Ritchie**, Phys. Rev. B **33**, 8336 (1987)
- [McI] **P.W.A. McIlroy**, J. Appl. Phys. **59**, 3532 (1986)
- [Mei95] **T. Meier, F. Rossi, P. Thomas, and S.W. Koch**, Phys. Rev. Lett. **75**, 2558 (1995)
- [Mei98] **T. Meier, P. Thomas, and S.W. Koch**, Phys. Low-Dim. Struct. 3/4, 1 (1998)
- [Mei00] **T. Meier**, *Theory of Electric Field Effects and Many-Body Correlations in Semiconductor Optics*, Habilitationsschrift, Marburg (2000)
- [Mein99] **G. Meinert, L. Bányai, and H. Haug**, phys. stat. sol.(b) **211**, 651 (1999)
- [Mein00/1] **G. Meinert, L. Bányai, P. Gartner, and H. Haug**, Phys. Rev. B **62**, 5003 (2000)
- [Mein00/2] **G. Meinert, L. Bányai, P. Gartner, and H. Haug** phys. stat. sol.(b) **221**, 481 (2000)
- [Mein01] **G. Meinert, L. Bányai, and P. Gartner**, Phys. Rev. B im Druck
- [Men] **E.E. Mendez, F. Agulló-Rueda, and J.M. Hong**, Phys. Rev. Lett. **60**, 2426 (1988)
- [Mov] **B. Movaghar**, Semicond. Sci. Technol. **2**, 185 (1987)

- [Mou] **G. Mourou, C. Stancampiano, A. Antonetti, and A. Orszag**, Appl. Phys. Lett **39**, 295 (1981)
- [Mur] **B.N. Murdin, W. Heis, C.J.G.M. Langerak, S.-C. Lee, I. Galbraith, G. Strasser, E. Gornik, M. Helm, and C.R. Pidgeon**, Phys. Rev. B **55**, 5171 (1997)
- [Nak] **M. Nakayama**, *Wannier-Stark Localization in Semiconductor Superlattices in Optical Properties of Low-Dimensional Materials*, Ed. T. Oga-
wa and Y Kanemitsu, World Scientific, Singapore (1995), p. 147
- [Ned] **S.S. Nedorezov**, Fiz. Tverd. Tela **12**, 2269 (1970).
Sov. Phys. - Solid State **12**, 1814 (1971)
- [Nen] **G. Nenciu**, Rev. Mod. Phys. **63**, 91 (1991)
- [Nor] **K.B. Nordstrom, K. Johnsen, S.J. Allen, A.-P. Jauho, B. Bir-
nir, J. Kono, T. Noda, H. Akiyama, and H. Sakaki**, Phys. Rev.
Lett. **81**, 457 (1998)
- [Nus94] **M.C. Nuss, P.C.M. Planken, I. Brener, H.G. Roskos, M.S.C.
Luo, and S.L. Chuang**, Appl. Phys. B **58**, 249 (1994)
- [Nus96] **M. Nuss**, IEEE Circu. Devices **12**, 25 (1996)
- [Nus98] **M. Nuss and J. Orenstein**, *Terahertz time-domain spectroscopy*, in
*Topics in Applied Physics, Millimeter and Submillimeter Wave Spec-
troscopy of Solids* **74**, Ed. G. Grüner, Springer, Berlin (1998), p. 8
- [Oht98] **H. Ohtake, S. Izumida, Z. Liu, S. Ono, and N. Sarukura**, OSA
TOPS **18** Radiative Processes and Dephasing in Semiconductors, Ed.
D.S. Citrin, Optical Society of America 1998 (p. 127)
- [Oht00] **H. Ohtake, S. Ono, M. Sakai, Z. Liu, and N. Sarukura**, J Lumin.
87 - 89, 902 (2000)
- [Ont] **A. Onton**, *Festkörperprobleme*, Ed. H.J. Queisser, Vieweg, Braun-
schweig (1973)
- [Peg] **N. Pegyghamberian, S.W. Koch, and A. Mysyrowicz**, *Introduc-
tion to Semiconductor Optics*, Trentice Hall, Englewood Cliffs (1993)

- [Pla] **P.C.M. Planken, M.C. Nuss, I. Brener, K.W. Goosen, M.S.C. Luo, S.L. Chuang, and L. Pfeiffer**, Phys. Rev. Lett. **69**, 3800 (1992)
- [Reb] **Y. Rebane**, Sov. Phys. Solid State **27**, 824 (1985)
- [Rosa99] **B. Rosam, F. Löser, V. G. Lyssenko, K. Leo, S. Glutsch, F. Bechstedt, and K. Köhler**
- [Rosa00] **B. Rosam, D. Meinhold, F. Löser, V. G. Lyssenko, K. Leo, S. Glutsch, F. Bechstedt, and K. Köhler**, phys stat. sol(a) **221**, 431 (2000)
- [Rosa] **B. Rosam, D. Meinhold, F. Löser, V. G. Lyssenko, S. Glutsch, F. Bechstedt, F. Rossi, K. Köhler, and K. Leo**, Phys. Rev. Lett., im Druck
- [Ros92] **H.G. Roskos, M.C. Nuss, J. Shah, K. Leo, D.A.B. Miller, A.M. Fox, S. Schmitt-Rink, and K. Köhler**, Phys. Rev. Lett **68**, 2216 (1992)
- [Ros94] **H.G. Roskos**, *Coherent Emission of Electromagnetic Pulses from Bloch Oscillations in Semiconductor Superlattices* in *Festkörperprobleme/Adv. Solid State Phys.* **34** (1994), p. 297
- [Ross95] **F. Rossi, T. Meier, P. Thomas, and S.W. Koch**, Phys. Rev. B **51** (1995) 16943
- [Ross96] **F. Rossi, M. Gulia, P.E. Selbmann, E. Molinari, T. Meier, P. Thomas, and S.W. Koch**, in *The Physics of Semiconductors*, Proceedings of the 23rd ICPS, Ed. M. Scheffler and R. Zimmermann, World Scientific, Singapore (1996) p. 1775
- [Ross98] **F. Rossi**, *Bloch Oscillations and Wannier-Stark Localisation in Semiconductor Superlattices* in *Theory of Transport Properties of Semiconductor Nanostructures*, Ed. E. Schöll, Chapman & Hall, London (1998), p. 283
- [Sal] **B.E.A. Saleh and M.C. Teich**, *Fundamentals on Photonics* (Wiley, New York, 1991)
- [Sar] **N. Sarukura, H. Ohtake, S. Izumida, and Z. Liu**, J. Appl. Phys. **84**, 654 (1998)

- [Schi] **J. Schilp, T. Kuhn, and G. Mahler**, Phys. Rev. B **50**, 5435 (1994)
- [khSchm] **K.H. Schmidt, N. Linder, G.H. Döhler, H.T. Grahn, K. Ploog, and H. Schneider**, Phys. Rev. Lett. **72**, 2769 (1994)
- [omSchm] **O.M. Schmitt, D.B. Tran Thoai, P. Gartner, L. Bányai, and H. Haug**, Phys. Rev. Lett. **86**, 3839 (2001)
- [Scho] **R. Scholz, T. Pfeiffer, and H. Kurz**, Phys. Rev. B **47**, 16229 (1993)
- [Sha] **J. Shah**, *Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures*, Springer, Berlin (1996)
- [Sie] **K. Siebert**, *THz-Bildgebung*, Homepage Arbeitsgruppe Roskos, <http://www.rz.uni-frankfurt.de/piweb/femto/index.html>
- [Som94] **D. Some and A.V. Nurmikko**, Appl. Phys. Lett. **65**, 3377 (1994)
- [Som96] **D. Some and A.V. Nurmikko**, Phys. Rev. B **53**, R13295 (1996)
- [Sud] **M. Sudzius, V.G. Lyssenko, F. Löser, K. Leo, M.M. Dignam, and K. Köhler**, Phys. Rev. B **57**, R12693 (1998)
- [Unt99] **K. Unterrainer, R. Kersting, R. Bratschitsch, G. Strasser, J.N. Heyman, K.D. Maranowski, and A.C. Gossard**, Physica E **7**, 693 (2000)
- [Unt00] **K. Unterrainer, R. Kersting, R. Bratschitsch, T. Müller, G. Strasser, and J.N. Heyman**, Physica E **9**, 76 (2001)
- [Vau] **T.A. Vaughan, R.J. Nicolas, C.J.G.M. Langerak, B.N. Mordin, C.R. Pidgeon, N.J. Mason, and P.J. Walker**, Phys. Rev B **53**, 16481 (1996)
- [Voi] **P. Voisin, J. Bleuse, C. Bouche, S. Gailard, C. Alibert, and A. Regreny**, Phys. Rev. Lett. **61**, 1639 (1988)
- [vPle92] **G. von Plessen and P. Thomas**, Phys. Rev. B **45**, 9185 (1992)
- [vPle94] **G. von Plessen, T. Meier, J. Feldmann, E.O. Göbel, P. Thomas, K.W. Goosen, J.M. Kuo, and R.F. Kopf**, Phys. Rev. B **49**, 14058 (1994)

- [Vu] **Q.T. Vu** and **H. Haug**, Phys. Rev. B **62**, 7179 (2000)
- [Wan60] **G.H. Wannier**, Phys. Rev. **117**, 432 (1960)
- [Wan62] **G.H. Wannier**, Rev. Mod. Phys. **34**, 645 (1962)
- [War] **P. Warmenbol**, **F.M. Peeters**, **X. Wu**, and **J.T. Devreese**, Phys. Rev. B **40**, 6258 (1989)
- [Wasch93] **C. Waschke**, **H.G. Roskos**, **R. Schwedler**, **K. Leo**, **H. Kurz**, and **K. Köhler**, Phys. Rev. Lett. **70**, 3319 (1993)
- [Wasch94/1] **C. Waschke**, **H.G. Roskos**, **K. Leo**, **H. Kurz**, and **K. Köhler**, Semicond. Sci. Technol. **9**, 416 (1994)
- [Wasch94/2] **C. Waschke**, **P. Leisching**, **P. Haring Bolivar**, **R. Schwedler**, **F. Brüggemann**, **H.G. Roskos**, **K. Leo**, **H. Kurz**, and **K. Köhler**, Solid State Electron. **37**, 1321 (1994)
- [Wei] **C. Weisbuch** and **B. Vinter**, *Quantum Semiconductor Structures*, Academic Press, Boston (1991)
- [Win] **S. Winnerl**, **E. Schomburg**, **J. Grenzer**, **H.-J. Regl**, **A.A. Ignatov**, **K.F. Renk**, **D.P. Pavelev**, **Y. Koschurinov**, **B. Melzer**, **V. Ustinov**, **S. Ivanov**, **S. Schaposchnikov**, and **P.S. Kopev**, Superlatt. and Micorstruct. **21**, 91 (1997)
- [mWu98/1] **M.W. Wu** and **H. Haug**, Sol. Sta. Comm. **108**, 809 (1998)
- [mWu98/2] **M.W. Wu** and **H. Haug**, Phys. Rev. B **58**, 13060 (1998)
- [xWu] **X.-G. Wu** and **F.M. Peeters**, Phys. Rev. B **55**, 9333 (1997)
- [Yab] **E. Yablonovitch**, **J.P. Heritage**, **D.E. Aspnes**, and **Y. Yafet** Phys. Rev. Lett. **63**, 976 (1989)
- [Yac] **Y. Yacoby**, Phys. Rev. **169**, 610 (1968)
- [Yam] **M. Yamanishi**, Phys. Rev. Lett. **59**, 1014 (1987)
- [Yan] **R.-H. Yan**, **R.J. Simes**, and **L.A. Coldren**, IEEE J. Quantum Electron. **25**, 2272 (1989)
- [Zak] **J. Zak**, Phys. Rev. Lett. **20**, 1477 (1968)

- [Zakh] **B.P. Zakharchenya, D.N. Mirlin, V.I. Perel', and I.I. Reshina**, Sov. Phys. Usp. 25(3), 143 (1982)
- [Zha90] **X.-C. Zhang, B.B. Hu, J.T. Darrow, and D.H. Auston**, Appl. Phys. Lett. **56**, 886 (1990)
- [Zha96] **X.-C. Zhang**, J. Lumin. **66 & 67**, 488 (1996)
- [Zha98] **X.-C. Zhang**, *IEEE/LEOS Distinguished Lecturer Notes 1998-2000*, <http://www.rpi.edu/~zhangxc/>
- [Zen] **C. Zener**, Proc. R. Soc. London Ser. A **145**, 523 (1934)
- [Zim] **J.M. Ziman**, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge University Press, London (1972)

Lebenslauf

Gerald Meinert

Geburt: 31.12.1969 Kelkheim (Taunus)

Familienstand: ledig

Staatsangehörigkeit: deutsch

Schule	1976-1986	Grundschule, Gymnasialzweig Gesamtschule
	1986–1989	Gymnasiale Oberstufe
Zivildienst	09/1989–12/1990	Mobiler sozialer Hilfsdienst
Studium	ab 04/1991	Studium der Physik an der Universität Frankfurt
	04/1993	Vordiplom in Physik
	12/1994–06/1996	Diplomarbeit in theoretischer Physik
	11/1996	Diplomprüfung in Physik
Doppelstudium	04/1993–11/1996	Offizielles Doppelstudium Physik/Mathematik
	07/1993	Vordiplom in Mathematik
Promotion	ab 02/1997	Theoretische Halbleiterphysik bei Prof. Dr. H. Haug
	04/2000	Vortrag auf der NOEKS 2000
Universitäre Anstellungen	1994–1996	Wissenschaftl. Hilfskraft im Fachbereich Mathematik Leitung von Übungsgruppen
	1997–2000	Vorlesungsververtretungen für Prof. Dr. H. Haug, Organisation der vorlesungsbegleitenden Übungen

Publikationen und Vorträge

Publikationsliste

1. **G. Meinert, L. Bányai, and H. Haug**, phys. stat. sol. (b) **211**, 651 (1999)
'Valence Band Structure of a GaAs Superlattice'
2. **G. Meinert, L. Bányai, P. Gartner, and H. Haug**, Phys. Rev. B **62**, 5003 (2000)
'Theory of THz Emission from Optically Excited Semiconductors in Crossed Electric and Magnetic Fields'
3. **G. Meinert, L. Bányai, P. Gartner, and H. Haug**, phys. stat. sol. (b) **221**, 481 (2000)
'Current Relaxation Kinetics in Crossed Magnetic and Electric Fields'
4. **G. Meinert, L. Bányai, and P. Gartner**, Phys. Rev. B in print
'Classical Polarons in a Constant Electric Field'

Vorträge

- Vortrag Physikalisches Institut Frankfurt 01/2000
- Nonlinear Optics and Excitation Kinetics in Semiconductors (NOEKS), Marburg (Germany), 04/2000

Danksagung

An erster Stelle ist es mir eine Freude, Prof. H. Haug meinen Dank für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe und die Möglichkeit zur Promotion auszusprechen. Er hat diese Arbeit angeregt, gelenkt, betreut und immer wieder motiviert. Auf seine Initiative hin war es mir vergönnt, meine Ergebnisse auf der NOEKS 2000 vorzutragen. Sollte ich die Frankfurter Mensa nicht allzu sehr vermissen, den vielen interessanten Gesprächen und Diskussionen am Mittagstisch auch weit über die Physik hinaus werde ich sicherlich nachtrauern.

Prof. L. Bányai danke ich für das ganze Spektrum an Betreuung, von Tricks und Kniffen in den Bits und Bytes bis zu Vision, Konzeption und Polarisation.

Dr. P. Gartner gilt mein Dank als unermüdlicher Jagdgefährte, den Teufel im Detail aufzuspüren.

Dr. Q.T. Vu, Dr. B. Mieck, Dr. E. Reitsamer, A. Schmenkel, N. Hahn, A. Schmitt, sowie A. Stein haben dazu beigetragen, dass ich mich in der Arbeitsgruppe sehr wohl gefühlt habe.

Zur guten und internationalen Atmosphäre trugen auch die Gäste und Mitarbeiter Dr. D.B. Tran Thoai, Dr. A. Ivanov, Dr. A. Dzybenko, Prof. L.V. Keldysh und Dr. M.W. Wu bei.

Experimentelle Hilfe- und Fragestellung verdanke ich der Arbeitsgruppe Prof. H. Roskos, insbesondere A. Hummel und T. Bauer.

Der DFG schulde ich Dank für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des Schwerpunktes „Quantenkohärenz in Halbleitern“.

O.M. Schmitt für all die kleinen und großen Hilfen zu danken, würde den Rahmen sprengen, deshalb nur Danke für die Freundschaft!

Meiner Familie, Danke!

Anna, *cnacudo!*